



Universidad Autónoma de Querétaro

Facultad de Ingeniería

Diseño y fabricación de microcavidades Fabry-Pérot
basadas en silicio poroso con aplicación a láseres.

Tesis

Que como parte de los requisitos para obtener el
grado de

Ingeniero Físico

Presenta

Iván Alonso Luján Cabrera

Dirigido por:

Asesor: Dr. Cristian Felipe Ramírez Gutiérrez

Co-asesor: Dr. Mario Enrique Rodríguez García

Querétaro, Qro., a 17 de abril de 2021



Universidad Autónoma de Querétaro
Facultad de Ingeniería
Ingeniería Física

**DISEÑO Y FABRICACIÓN DE MICROCAVIDADES FABRY-PÉROT BASADAS
EN SILICIO POROSO CON APLICACIÓN A LÁSERES**

TESIS

Que como parte de los requisitos para obtener el grado de
INGENIERO FÍSICO

Presenta:

Iván Alonso Luján Cabrera

Dirigido por:

Asesor

Dr. Cristian Felipe Ramírez Gutiérrez

Co-asesor

Dr. Mario Enrique Rodríguez García

SINODALES

Dr. Cristian Felipe Ramírez Gutiérrez
Presidente

Dra. María Lucero Gómez Herrera
Secretario

Dra. Beatriz Marcela Millán Malo
Vocal

Dr. Mario Enrique Rodríguez García
Suplente

Firma

Firma

Firma

Firma

Centro Universitario
Querétaro, QRO
México.
Abril 2021

© 2021 - Iván Alonso Luján Cabrera

Derechos reservados.

Dirección General de Bibliotecas de la UAQ

Dirección General de Bibliotecas de la UAQ

A mi madre y padre, a mis hermanos y a mi sobrino.

Agradecimientos

A mis padres, Rita y Juan, por el amor y apoyo incondicional que me brindaron en mi formación profesional y como persona.

A mis hermanos, Paola y Juan, por siempre estar presentes y dispuestos a ayudarme.

A mi asesor Dr. Cristian Felipe Ramírez Gutiérrez por ser un pilar fundamental en mi formación profesional. Gracias por todos sus consejos, esfuerzo, dedicación y motivación, que sin lugar a dudas me hicieron un mejor estudiante y persona.

Al Dr. Mario Enrique Rodríguez García, por abrirme las puertas de su laboratorio, por confiar en mí, siempre brindarme su apoyo y enseñarme algo nuevo cada día.

A mis compañeros de generación, por amistad y hacer de la carrera una experiencia más amena.

A mis compañeros del laboratorio de A-4.

A mi comité sinodal.

A el centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada (CFATA) de la UNAM Campus Juriquilla en el cual se desarrolló este trabajo de investigación.

A el Laboratorio Nacional de Caracterización de materiales (LaNCaM), a Alicia del Real y Carmen Peza Ledezma por su apoyo en las medidas de SEM.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el apoyo financiero brindado.

Abstract

The development of laser technology is an important branch of science and engineering and currently the development of new and better devices is one of its main objectives. This is why new materials are being sought for the manufacture of more compact and powerful devices. In this research work, the use of Fabry-Pérot type microcavities (MFP) based on porous silicon (PSi) for the manufacture of passive optical resonators with resonance wavelength in the visible spectrum with application to lasers is proposed. Two calibration series of the electrochemical cell, manufactured by electrochemical anodization and monitored with the photoacoustic method, were carried out to relate the fabrication parameters with the optical properties of PSi single layers using the transfer matrix method (TMM), effective medium approximation (EMA) and genetic algorithms (GA). Based on these calibration series, 6 photonic crystals, three distributed Bragg reflectors (DBR) and two MFPs, were designed and fabricated. All samples were characterized by UV-Vis spectroscopy and scanning electron microscopy (SEM) to obtain their optical and morphological properties. The effects of intrinsic manufacturing defects, such as interfacial roughness, on the optical response of CF and how they affect the optical quality of MFP for lasers' application were analyzed.

Resumen

El desarrollo de la tecnología láser es una rama importante para la ciencia e ingeniería y en la actualidad el desarrollo de nuevos y mejores dispositivos es uno de sus principales objetivos. Es por esto que se buscan nuevos materiales para la fabricación de dispositivos más compactos y potentes. En este trabajo de investigación se propone el uso de microcavidades tipo Fabry-Pérot (MFP) basadas en silicio poroso (PSi) para la fabricación de resonadores ópticos pasivos con longitud de onda de resonancia en el espectro visible con aplicación a láseres. Se llevaron a cabo dos series de calibración de la celda electroquímica, fabricadas mediante anodización electroquímica y monitoreadas con el método fotoacústico, para relacionar los parámetros experimentales con las propiedades ópticas de monocapas de PSi utilizando el método de la matriz de transferencia (TMM), teoría de medio efectivo (EMA) y algoritmos genéticos (GA). Con base en esto se diseñaron y fabricaron 6 cristales fotónicos (CF), tres reflectores de Bragg distribuidos (DBR) y dos MFP. Todas las muestras fueron caracterizadas mediante espectroscopía UV-Vis y microscopía electrónica de barrido (SEM) para obtener sus propiedades ópticas y morfológicas. Se analizaron los efectos de defectos intrínsecos de la fabricación, como la rugosidad interfacial, sobre la respuesta óptica de los CF y cómo éstos afectan la calidad óptica de las MFP para su aplicación en láseres.

Índice general

Agradecimientos

Abstract

Resumen

Índice

Índice de figuras

II

Índice de tablas

v

1. Introducción

1

2. Estado de la técnica

3

| | |
|--|----|
| 2.1. Láseres | 3 |
| 2.1.1. Principio de funcionamiento | 4 |
| 2.1.2. Resonadores ópticos pasivos | 8 |
| 2.2. Cristales fotónicos | 10 |
| 2.2.1. Estructura de bandas de un cristal fotónico en una dimensión | 11 |
| 2.2.2. Simulación de la respuesta óptica de cristales fotónicos basados en PSi | 17 |
| 2.3. Formación del silicio poroso | 23 |

3. Hipótesis y objetivos

28

| | |
|---------------------------------------|----|
| 3.1. Hipótesis | 28 |
| 3.2. Objetivo general | 28 |
| 3.3. Objetivos particulares | 28 |

4. Metodología

29

| | |
|--|----|
| 4.1. Materiales | 29 |
| 4.2. Monitoreo <i>in-situ</i> mediante fotoacústica | 29 |
| 4.3. Arreglo experimental para la fabricación de PSi | 30 |
| 4.4. Caracterización de las muestras | 31 |
| 4.4.1. Microscopía electrónica de barrido | 31 |
| 4.4.2. Espectroscopía UV-Vis | 31 |

| | |
|--|-----------|
| 5. Resultados y discusión | 33 |
| 5.1. Fabricación de monocapas a base de silicio poroso | 33 |
| 5.1.1. Serie de calibración | 33 |
| 5.2. Diseño y fabricación de reflectores de Bragg | 35 |
| 5.3. Efectos de la rugosidad en reflectores de Bragg basados en silicio poroso | 41 |
| 5.3.1. Rugosidad | 41 |
| 5.3.2. Diseño de estructuras | 43 |
| 5.3.3. Resultados numéricos | 43 |
| 5.4. Diseño y fabricación de microcavidades tipo Fabry-Pérot basadas en silicio poroso | 45 |
| 5.5. Publicaciones | 51 |
| 5.6. Trabajo futuro | 52 |
| 6. Conclusiones | 53 |
| References | 62 |
| Apéndice A. Fotoacústica | 63 |
| Apéndice B. Espectroscopía Uv-Vis | 66 |
| Apéndice C. Publicaciones | 69 |

Índice de figuras

| | |
|--|----|
| 2.1. Diagrama esquemático de los procesos de a) absorción, b) emisión espontánea y c) emisión estimulada. | 5 |
| 2.2. Cambio en el flujo de fotones (dF) de una onda plana que viaja en la dirección z debido a su interacción con un material de longitud dz | 6 |
| 2.3. Diagrama de inversión de población. | 7 |
| 2.4. Diagrama simple de un láser. | 8 |
| 2.5. Esquemas de cristales fotónicos en 1-2-3D. Tomado y adaptado [1]. | 11 |
| 2.6. Esquemas de un cristal fotónico en 1D en la dirección x . Está compuesto de capas alternantes con constantes dieléctricas ϵ_H y ϵ_L , con espesores d_H y d_L respectivamente. Encuadrada en color rojo se muestra la celda unitaria del cristal con una longitud a | 12 |
| 2.7. a) Estructura de bandas en la zona extendida de Brillouin para un CF simulado con $d_H = 100$ nm, $d_L = 130.3$ nm e índices de refracción $\eta_H = 2$, $\eta_L = 1.5$. b) Espectro de reflectancia del CF. c) Estructura de bandas en la primera zona de Brillouin. | 15 |
| 2.8. Supercelda para la simulación de la estructura de bandas de un CF con un defecto. | 16 |
| 2.9. Estructura de bandas de un CF con un defecto simulado con $d_H = 100$ nm, $d_L = 130.3$ nm, $d_{Hc} = 200$ nm e índices de refracción $\eta_H = \eta_{Hc} = 2$, $n_L = 1.5$. Encuadrada en color rojo se muestra la celda unitaria del cristal con una longitud D | 16 |
| 2.10. a) Espectro de reflectancia del CF con un defecto. b) Estructura de bandas en la primera zona de Brillouin. El modo de defecto en la reflectancia concuerda con el de la estructura de bandas. | 17 |
| 2.11. Representación gráfica de la aproximación de las propiedades eléctricas de una heteroestructura mediante EMA. | 18 |
| 2.12. Índice de refracción en función de la porosidad del c-Si a una longitud de onda de $\lambda = 808$ nm. | 18 |
| 2.13. Índice de refracción en función de la porosidad y la longitud de onda para el c-Si usando la regla de LLL. | 19 |
| 2.14. Diagrama de un DBR basado en PSi. | 21 |
| 2.15. Reflector de Bragg simulado con diferente cantidad de periodos. Los parámetros de simulación son: espesores $d_H = 100$ nm, $d_L = 133$ nm y porosidades de $p_H = 0.580$ y $p_L = 0.775$ | 22 |
| 2.16. Diagrama de una MFP basada en PSi. Tomado y adaptado de [2]. | 22 |

| | |
|--|----|
| 2.17. a) MFP basada en PSi con una capa de defecto de $d_c = 182$ nm de espesor y una porosidad de $p_c = 0.58$. b) Respuesta óptica de una MFP en función de la cantidad de periodos antes y después de la capa de defecto. | 23 |
| 2.18. Diagrama simple de la reacción electroquímica que tiene lugar en la formación de PSi. | 25 |
| 2.19. Curva corriente voltaje (J - V) característica para la formación de PSi mediante anodización química para a) silicio tipo p y b) para silicio tipo n . | 26 |
| 2.20. Diagrama simple de una celda electroquímica de dos electrodos utilizada para la fabricación de PSi. | 26 |
| 4.1. Arreglo experimental para la fabricación de PSi monitoreado con fotoacústica. Tomado y adaptado de [2]. | 30 |
| 5.1. a) Espectro de UV-Vis ajustado con GA, b) señal FA y c) imagen trasversal de SEM de una muestra de PSi fabricada a 5 mA/cm ² . | 33 |
| 5.2. Imágenes de SEM de sección transversal de las series de calibración. a) 5 mA/cm ² , b) 10 mA/cm ² , c) 15 mA/cm ² , d) 20 mA/cm ² , e) 30 mA/cm ² , f) 40 mA/cm ² , g) 50 mA/cm ² y h) 60 mA/cm ² . En cada imagen se muestra el tiempo total de anodización. Tomado y adaptado de [2]. | 34 |
| 5.3. Curvas de calibración. a) Tiempo de un ciclo FA el cual muestra un decaimiento exponencial. b) Porosidad obtenida mediante ajustes con GA y con medidas de SEM Y FA. c) Velocidad de crecimiento la cual presenta un comportamiento lineal. d) y e) Rugosidad interfacial determinada con ajuste GA. Todos los parámetros se muestran en función de la densidad de corriente. Tomado y adaptado de [2]. | 36 |
| 5.4. Señal FA producida durante la formación de los DBR: a) DBR550, c) DBR700 y d) DBR750. Las figuras b), d) y f) muestran imágenes de sección transversal tomadas con SEM para cada DBR respectivamente. Cada figura de FA muestra un acercamiento donde se define la formación de cada capa. g) Representa el perfil de corriente utilizado para la fabricación de los DBR. Tomado y adaptado de [2]. | 39 |
| 5.5. Espectros de reflectancia experimentales (negro) y simulados (rojo) para: a) DBR550, b) DBR700 y c) DBR750. Tomado y adaptado de [2]. | 40 |
| 5.6. Fotos de las muestras de: a) DBR550, b) DBR700 y c) DBR750. | 41 |
| 5.7. a) Representación de la rugosidad interfacial presente en un CF basado en PSi. b) Deformación del frente de onda y cambio de fase en las ondas reflejada y transmitida debido a la interacción con la interface rugosa. Tomado y adaptado de [3]. | 42 |
| 5.8. Efectos de la rugosidad en los diferentes casos analizados. a) Monocapa con contribuciones de rugosidad en la interface PSi/c-Si, b) DBR1 que presenta rugosidad en la interface Aire/DBR, c) DBR2 con contribuciones de rugosidad en todas las interfaces HL y d) DBR3 con rugosidad en la interface DBR/c-Si. Tomado y adaptado de [3]. | 44 |
| 5.9. Contraste entre la reflectancia ideal y la reflectancia con contribuciones de rugosidad para: a) una monocapa, b) DBR1, c) DBR2 y d) DBR3. Tomado y adaptado de [3]. | 45 |
| 5.10. Señal FA producida durante la formación de las MFP: a) MFP1, y c) MFP2. Las figuras b) y d) muestran imágenes de sección transversal tomadas con SEM para cada MFP respectivamente. e) y f) representan el perfil de corriente utilizado para la fabricación de capa MFP respectivamente. Tomado y adaptado de [2]. | 47 |
| 5.11. Espectros de reflectancia experimentales (negro) y simulados (rojo) para: a) MFP1 y b) MFP2. Tomado y adaptado de [2]. | 48 |

| | |
|---|----|
| 5.12. Fotos de las muestras de: a) MFP1 y b) MFP2. | 48 |
| 5.13. Efectos de la rugosidad en los diferentes casos analizados. a) MFP1r con contribuciones de rugosidad en el primer conjunto de periodos antes de la capa de defecto, b) MFP2r con contribuciones de rugosidad en el segundo conjunto de periodos y c) MFP3r con rugosidad en todas las interfaces. Tomado y adaptado de [3]. | 49 |
| 5.14. Contraste entre la reflectancia ideal y la reflectancia con contribuciones de rugosidad para: a) MFP1r, b) MFP2r y c) MFP3r . Tomado y adaptado de [3]. | 50 |
| A.1. Señales FA <i>in-situ</i> de la serie de calibración S1 de las muestras a) 5 mA/cm ² , b) 10 mA/cm ² , c) 15 mA/cm ² , d) 20 mA/cm ² , e) 25 mA/cm ² y f) 30 mA/cm ² | 63 |
| A.2. Señales FA <i>in-situ</i> de la serie de calibración S1 de las muestras a) 40 mA/cm ² , b) 50 mA/cm ² y c) 60 mA/cm ² | 64 |
| A.3. Señales FA <i>in-situ</i> de la serie de calibración S2 de las muestras a) 5 mA/cm ² , b) 10 mA/cm ² , c) 15 mA/cm ² , d) 20 mA/cm ² , e) 25 mA/cm ² , f) 30 mA/cm ² , g) 40 mA/cm ² , h) 50 mA/cm ² , i) 60 mA/cm ² | 65 |
| B.1. Espectros de reflectancia de la serie de calibración S1 de las muestras a) 5 mA/cm ² , b) 10 mA/cm ² , c) 15 mA/cm ² , d) 20 mA/cm ² , e) 25 mA/cm ² y f) 30 mA/cm ² | 66 |
| B.2. Espectros de reflectancia de la serie de calibración S1 de las muestras a) 40 mA/cm ² , b) 50 mA/cm ² y c) 60 mA/cm ² | 67 |
| B.3. Espectros de reflectancia de la serie de calibración S2 de las muestras a) 5 mA/cm ² , b) 10 mA/cm ² , c) 15 mA/cm ² , d) 20 mA/cm ² , e) 25 mA/cm ² , f) 30 mA/cm ² , g) 40 mA/cm ² , h) 50 mA/cm ² y i) 60 mA/cm ² | 68 |

Índice de tablas

| | |
|---|----|
| 2.1. Nomenclatura para las categorías de poros en silicio. | 23 |
| 2.2. Técnicas de fabricación de PSi. | 24 |
| 2.3. Parámetros de fabricación y sus efectos en la formación de PSi. | 26 |
| 5.1. Parámetros de diseño para los DBRs. | 37 |
| 5.2. Parámetros experimentales de anodización usados en la fabricación y parámetros experimentales obtenidos para los DBR a basados en PSi. Los espesores se midieron mediante SEM. Las porosidades y rugosidad fueron obtenidas mediante ajustes con GA. El ancho del PBG y la longitud de centrado fueron determinadas con los espectros de reflectancia. | 38 |
| 5.3. Parámetros de diseño para las MFPS. | 46 |
| 5.4. Parámetros experimentales usados en la fabricación de MFP a base de PSi. Espesores determinados mediante SEM. Las porosidades y rugosidad fueron obtenidas mediante ajustes con GA. El ancho del PBG y la longitud de centrado de las cavidades fueron determinadas con los espectros de reflectancia. | 46 |

Introducción

El desarrollo de la tecnología láser, así como la invención del transistor y la computadora se consideran como los avances tecnológicos más importantes del del siglo XX. El desarrollo e investigación alrededor del láser ha tenido un rol indispensable y ha dado pie a grandes avances en la investigación científica, ingeniería, telecomunicaciones, medicina, agricultura e industria [4] [5] [6]. Aunque la base teórica para la invención del láser se estableció hace más de 100 años, y el primer láser se fabricó en los años 60's, hoy en día se siguen haciendo avances para producir láseres cada vez más compactos y eficientes [7].

Un láser produce radiación coherente y monocromática mediante emisión estimulada de transiciones atómicas específicas de un material excitado [8]. Un láser está compuesto principalmente de tres partes: un medio activo, una fuente de energía o fuente de bombeo, y un medio pasivo o resonador óptico. El medio activo es un material al cual se le da energía con la fuente de bombeo para generar una inversión de población atómica y así producir la emisión estimulada. Un resonador pasivo consiste comúnmente de dos espejos que son situados entre el medio activo y tiene la función de confinar la luz con la longitud de onda específica de la transición atómica para generar una retroalimentación y amplificar la intensidad de luz emitida por el medio activo [9]. Normalmente los espejos utilizados en resonadores de láseres deben ser de alta calidad [10].

Existen diversos tipos de resonadores pasivos, entre los cuales se encuentran los resonadores concéntricos (o esféricos) que consisten en dos espejos esféricos con el mismo radio de curvatura separados por una distancia tal que el centro de curvatura de ambos sea coincidente. Otro tipo de resonador utilizado en la fabricación de láseres es el confocal, que al igual que el resonador concéntrico, se conforma de dos espejos esféricos, sin embargo, la distancia que los separa es tal que el foco del un espejo coincide con el foco del segundo espejo. Finalmente, resonadores planos (o Fabry-Pérot) donde el medio activo es situado entre dos espejos totalmente paralelos [9] [11].

En la actualidad, la mayoría de los láseres que se utilizan en áreas de la ciencia e ingeniería son basados en semiconductores y resonadores planos. Los láseres semiconductores son láseres de estado sólido basados en medios activos de semiconductores, donde el efecto láser generalmente se logra mediante una transición banda/banda en condiciones de alta densidad de portadores en la banda de conducción [12] [13]. Uno de los tipos de láseres basados en semiconductores que ha atraído la atención son los láseres con resonadores pasivos basados en cristales fotónicos debido a

que este tipo de resonadores pueden tener factores de calidad altos [14, 15, 16]. Se ha desarrollado dispositivos láser basados en cristales fotónicos fabricados con semiconductores III-V [17, 18, 19] los cuales operan en el rango del infrarrojo cercano y recientemente en el espectro visible [20].

Un material el cual ha probado ser un excelente candidato para la fabricación de cristales fotónicos (CF) es el silicio poroso (PSi) [2]. El PSi es un material nanocompuesto y nanoestructurado con una gran área superficial y diversa morfología de poros comúnmente obtenido a través de anodización electroquímica. Este material atrajo atención de estudio por su fotoluminiscencia eficiente a temperatura ambiente [21, 22], sin embargo, tiempo después se encontró que el PSi es un material óptico versátil, siendo utilizado para aplicaciones de biosensores [23, 24, 25] y nanomedicina [26, 27]. Las propiedades ópticas del material pueden ser modificadas o sintonizadas controlando los parámetros intrínsecos y extrínsecos durante la fabricación del PSi, y dado el carácter autolimitado de la reacción, es posible fabricar estructuras multicapa como Reflectores de Bragg Distribuidos (DBR) con una gran cantidad de periodos [28] y microcavidades con altos factores de calidad [29, 30]. La versatilidad y las propiedades ópticas modificables del PSi lo hacen un candidato para la fabricación de microcavidades para dispositivos emisores de luz como lo son los láseres [31].

Se han publicado trabajos referentes al uso de PSi para la fabricación de microcavidades basadas en PSi para aplicación a láseres. En años recientes se demostró en varios trabajos que, mediante una técnica de impresión por transferencia modificada (PSi autosustentado), DBR basados en PSi podían servir como base de microcavidades para dispositivos fotoemisores utilizando un polímero como medio activo [32, 33]. Sin embargo, estos trabajos no se centran en el estudio de las propiedades de microcavidades en la región visible del espectro electromagnético. Este trabajo de investigación tiene como propósito el estudio de microcavidades basadas en PSi como resonadores pasivos para láseres en el espectro visible. Se estudiará una metodología basada en el monitoreo *in-situ* mediante fotoacústica para el diseño y fabricación de microcavidades Fabry-Pérot (MFP) basadas en PSi en el espectro visible, así como los efectos de factores extrínsecos, como la corriente de anodización, e intrínsecos, como la rugosidad interfacial en la respuesta y calidad óptica de los dispositivos fabricados.

Estado de la técnica

2.1. Láseres

La invención del láser es considerada uno de los logros tecnológicos más importantes del siglo XX, ya que éste tiene un importante papel en diversas áreas de la ciencia e ingeniería como medicina, telecomunicaciones, manufactura tradicional y aditiva. El nombre de láser es un acrónimo de “Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation”, la cual es una forma de radiación altamente coherente y monocromática.

En 1917, Albert Einstein, basándose en la descripción de la luz hecha por Max Planck y en el efecto fotoeléctrico, propuso el proceso por el cual el efecto láser sería posible, la emisión estimulada de luz. Einstein teorizó que bajo ciertas circunstancias, los átomos podían emitir radiación de una longitud de onda específica. Sin embargo, tendrían que pasar cerca de 40 años para que se corroborara experimentalmente la emisión estimulada de luz. En 1954, Charles Hard Townes de la universidad de Columbia, junto con Herbert J. Zeiger y James P. Gordon, construyen el primer maser (microwave amplification by stimulated emission of radiation) [34]. Este dispositivo, basado en las predicciones de Einstein, fue el primero en generar y amplificar ondas electromagnéticas por emisión estimulada. El maser radiaba a una longitud de onda de aproximadamente 1 cm con una potencia de 10 nW. En 1955 fue propuesto un método de absorción negativa llamado método de bombeo [35].

El acrónimo láser fue utilizado por primera vez por Gordon Gould en 1957, estudiante graduado de la universidad de Columbia, un año más tarde, Charles Townes y Arthur Schawlow demostraron que los maser pueden operar en las regiones infraroja y visible, al igual que propusieron un método para lograrlo [7].

Theodore H. Maiman, un físico de Hughes Research Laboratories en Malibu, California, construyó en 1960 el primer láser usando un cilindro de rubí sintético (Al_2O_3), con los extremos recubiertos de plata para hacerlos reflectantes y capaces de actuar como un resonador Fabry-Perot [36]. Maiman utilizó lámparas de destellos fotográficos como fuente de bombeo del láser. Posteriormente, se hicieron mejoras a este láser, y también la implementación de otros materiales para la fabricación de láseres, como el láser de neodimio [37] fabricado en 1961 por Elias Snitzer y el láser de dióxido de carbono (CO_2) el cual fue inventado por Kumar Patel en laboratorios Bell. En la actualidad,

la tendencia alrededor de el estudio de los láseres es la fabricación de láseres estables de mayor potencia, compactos y de longitud de onda sintonizable [7].

2.1.1. Principio de funcionamiento

En 1924, Erwin Schrödinger propuso un modelo atómico en el cual los electrones se describen como ondas estacionarias en el espacio caracterizadas por una función de onda. Los electrones se distribuyen en orbitales atómicos, que son regiones espaciales con una alta probabilidad de encontrar al electrón. En este modelo, la función de onda está determinada por números cuánticos (n, l, m) y la energía de los electrones está cuantizada, es decir, éstos solo pueden estar en determinados niveles energéticos (con energía E_n para $n = 1, 2, 3, \dots$). Los electrones pueden ser promovidos a otros estados energéticos mediante una transición atómica, dichas transiciones dependen del tipo de átomo que se considere y sus reglas de selección.

Para que un electrón sea promovido a un estado de mayor energía, el átomo debe absorber energía. Esta transición se puede dar a través de varios mecanismos como choques inelásticos con otros átomos o la absorción de un fotón. Por otro lado, cuando un electrón decae a un estado de menor energía, el átomo libera energía que puede ser en forma de un fonón (transición no radiativa) o en forma de un fotón (transiciones radioactivas). Estas últimas transiciones pueden ocurrir mediante emisión espontánea o estimulada.

Para describir el fenómeno de la absorción, se supone un átomo de dos niveles de energías E_1 y E_2 , tales que $E_1 < E_2$. Estos dos niveles pueden ser cualquiera de los niveles energéticos de dicho átomo, pero por conveniencia se toma el nivel 1 como el estado base. Se supone que el estado inicial del átomo es el 1, para promover una transición al estado 2, el átomo debe absorber un fotón cuya energía coincida con la diferencia de energía entre ambos niveles. La frecuencia ν_0 del fotón está dada por la siguiente expresión

$$\nu_0 = \frac{E_2 - E_1}{h}, \quad (2.1)$$

donde h es la constante de Planck. Por lo tanto, en el proceso de absorción, el átomo interactúa con un fotón de una frecuencia específica ($\nu = \nu_0$) y existe una probabilidad de que éste sea promovido a un nivel energético mayor (ver figura 2.1a).

Posteriormente, se supone que el estado inicial del átomo es el 2, en general cuando un átomo se encuentra en un estado de energía excitado, éste tenderá a decaer a un nivel de menor energía, en este caso al 1. De esta forma, la correspondiente energía $E_2 - E_1$ debe ser liberada por el átomo. Cuando esta energía es liberada en forma de un fotón (con dirección y fase aleatoria) se conoce como emisión espontánea (ver figura 2.1b). El tiempo promedio que le toma a un átomo decaer se le conoce como tiempo de vida de emisión espontánea y se representa como τ .

Si el átomo se encuentra en el estado 2, y un fotón con frecuencia $\nu = \nu_0$ incide en él en un tiempo menor que τ , dado que el fotón tiene la misma frecuencia que la transición atómica, existe una probabilidad de que el fotón genere una transición del estado 2 al 1. En este caso se libera un fotón con frecuencia ν_0 , a este proceso se le conoce como emisión estimulada (ver figura 2.1c). En el caso de emisión estimulada, dado que la transición es forzada por un fotón externo, la onda

emitida por el átomo viaja en la misma dirección y está en fase con la onda incidente [9].

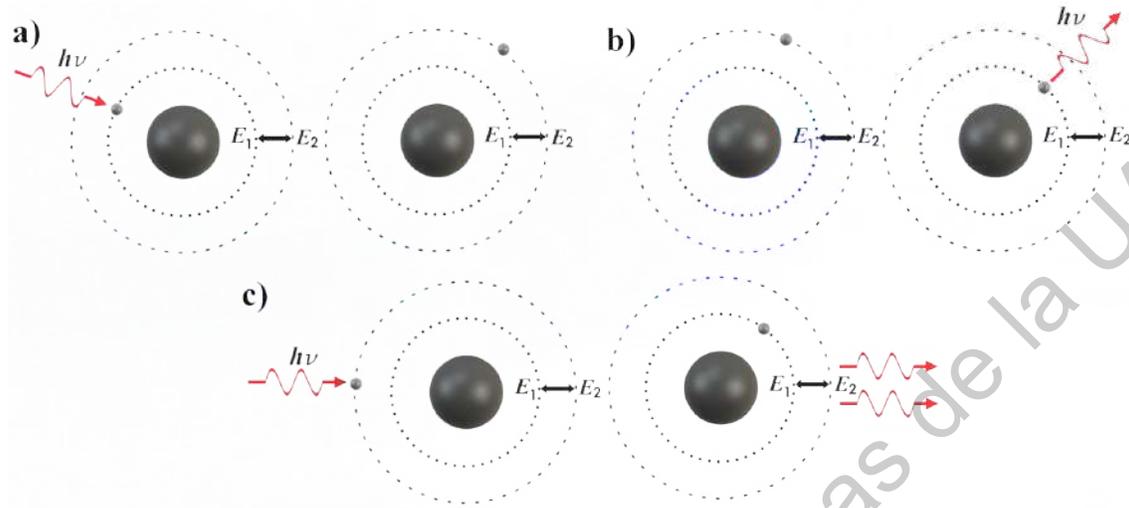


Figura 2.1: Diagrama esquemático de los procesos de a) absorción, b) emisión espontánea y c) emisión estimulada.

Para estimar las probabilidades de que ocurran estos fenómenos, se considera N_i (población del nivel i para $i = 1, 2$) como el número de átomos o moléculas por unidad de volumen en un tiempo t que se encuentran en el nivel de energía i . La probabilidad de que ocurra la emisión espontánea se puede definir considerando que la tasa de decaimiento de la población del nivel superior es proporcional a la población N_2 , es decir

$$\left(\frac{dN_2}{dt}\right)_{esp} = -AN_2, \quad (2.2)$$

donde A es una constante positiva llamada tasa de emisión espontánea o coeficiente A de Einstein, que depende de la transición considerada. El tiempo de vida se puede definir en función de A de la siguiente manera $\tau = 1/A$.

Para el caso de emisión estimulada se tiene que:

$$\left(\frac{dN_2}{dt}\right)_{est} = -W_{21}N_2, \quad (2.3)$$

donde W_{21} es la tasa de emisión estimulada para una transición del estado 2 al 1, y depende de la transición y la intensidad de la onda electromagnética incidente. Particularmente, para una onda plana

$$W_{21} = \sigma_{21}F, \quad (2.4)$$

donde F es el flujo de fotones de la onda y σ_{21} es la sección transversal efectiva de emisión estimulada que a su vez depende la transición considerada.

De igual manera que la ecuación (2.3), para el caso de absorción se tiene que

$$\left(\frac{dN_1}{dt}\right)_{ab} = -W_{12}N_1, \quad (2.5)$$

donde W_{12} es la tasa de emisión espontánea para una transición del estado 1 al 2, dada por

$$W_{12} = \sigma_{12}F, \quad (2.6)$$

Para niveles de energía no degenerados se tiene que $W_{12} = W_{21}$ y $\sigma_{12} = \sigma_{21}$. Para el caso degenerado, si los niveles 1 y 2 tienen una degeneración g_1 y g_2 respectivamente, se tiene que $g_1W_{12} = g_2W_{21}$ y $g_1\sigma_{12} = g_2\sigma_{21}$.

Un dispositivo láser requiere de los siguientes condiciones: dos niveles de energía arbitrarios 1 y 2 de un material con poblaciones N_1 y N_2 respectivamente y la incidencia de una onda plana que se propague en la dirección z e incida en el material (figura 2.2). El cambio infinitesimal en el flujo (dF) debido a la interacción con un elemento infinitesimal del material de longitud dz , será causado por los procesos descritos anteriormente. Sea S el área transversal(eficaz) del haz de fotones, el cambio en el flujo de fotones en el volumen sombreado por unidad de tiempo será SdF . Dado que la absorción remueve fotones, y la emisión crea fotones, el cambio debe ser proporcional a la diferencia entre los eventos de emisión y absorción. De las ecuaciones (2.3) y (2.5) podemos escribir

$$SdF = (W_{21}N_2 - W_{12}N_1)(Sdz), \quad (2.7)$$

o, de igual manera

$$dF = \sigma_{21}F[N_2 - (g_2N_1/g_1)]dz. \quad (2.8)$$

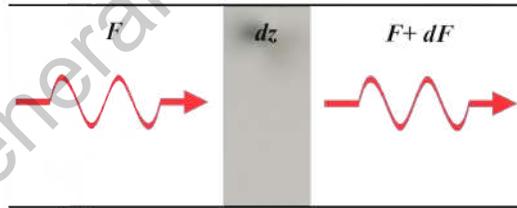


Figura 2.2: Cambio en el flujo de fotones (dF) de una onda plana que viaja en la dirección z debido a su interacción con un material de longitud dz .

En el equilibrio térmico, las poblaciones están descritas por la estadística de Maxwell-Boltzmann, así se tiene que

$$\frac{N_2^e}{N_1^e} = \frac{g_2}{g_1} e^{-(E_2 - E_1)/k_B T}, \quad (2.9)$$

donde N_2^e y N_1^e son las poblaciones en el estado de equilibrio. Por lo tanto, en este estado se tiene que

$$N_2^e < \frac{g_2}{g_1} N_1^e, \quad (2.10)$$

lo cual, de acuerdo con la ecuación (2.8), indica que el material se comporta como un material absorbente a la frecuencia ν , ya que el flujo de fotones disminuye. Por otro lado, en una condición fuera del equilibrio, de tal forma que se tenga

$$N_2 > \frac{g_2}{g_1} N_1, \quad (2.11)$$

el material actúa como un amplificador, es decir, el flujo de fotones aumenta y se dice que existe una inversión de población.

La inversión de población consiste en aumentar la población de un nivel excitado de tal manera que su población sea mayor que la población de un nivel de energía menor. Este proceso se ilustra en la figura 2.3, la cual muestra un diagrama de la inversión de población en un átomo de cuatro niveles energéticos. Los electrones que se encuentran en el estado base (E_1) son promovidos al nivel energético E_4 mediante un mecanismo de bombeo. El electrón decae a los niveles de menor energía hasta que vuelve al estado base. Suponiendo que, el tiempo que tarda en decaer de 3 a 2 es más grande que el tiempo que tarda en decaer de 2 a 1, bajo un régimen de bombeo continuo, se producirá una inversión de población entre los estados de energía E_3 y E_2 , y un fotón que interactúe con dicha transición se amplificará de manera coherente mediante emisión estimulada. Un material en el cual es posible lograr una inversión de población se le llama medio activo.

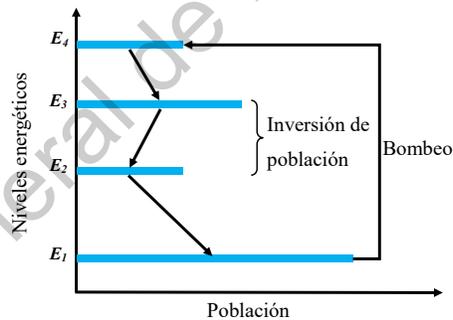


Figura 2.3: Diagrama de inversión de población.

El método de bombeo consiste, en este caso, en el proceso de promover a los electrones del estado base al estado excitado E_4 . Este proceso se puede lograr mediante una radiación o aplicando una corriente eléctrica al medio activo. Una vez que se ha generado la inversión de población en el medio activo mediante el proceso de bombeo, es necesario introducir una retroalimentación adecuada para aumentar la ganancia de fotones emitidos de forma estimulada, de tal forma que los fotones emitidos en la transición 3-2 sean producidos mayoritariamente mediante emisión estimulada. Para el caso de un láser, la retroalimentación se obtiene, generalmente, colocando el material activo entre dos espejos altamente reflectantes (ver figura 2.4), este sistema se conoce como un resonador óptico (también llamado medio pasivo). De esta manera, los fotones que viajan en fase y en la dirección

perpendicular a los espejos, rebotarán hacia adelante y hacia atrás entre los dos espejos y se amplificarán en cada paso a través del material activo. Si uno de los dos espejos es parcialmente reflejante, se obtiene un haz de láser como salida.

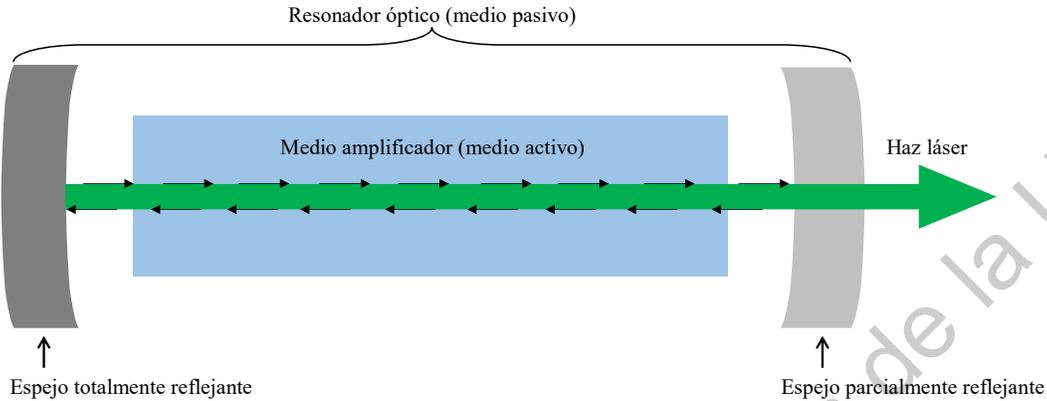


Figura 2.4: Diagrama simple de un láser.

2.1.2. Resonadores ópticos pasivos

Los resonadores ópticos pasivos (resonador en ausencia del medio activo) más utilizados en láseres tienen espejos planos o esféricos de forma rectangular separados por una distancia L . Comúnmente los resonadores son mucho más grandes que la longitud de onda del láser, ya que si la longitud del resonador es comparable con la de la longitud de onda del láser se tendrá una ganancia muy baja para generar el efecto láser [9].

La mayoría de los resonadores utilizados en láseres son abiertos (sin superficies alrededor de ellos) ya que esto reduce el número de modos los cuales pueden oscilar con pérdidas bajas. Los resonadores abiertos han sido también utilizados para la fabricación de antenas y sensores [38, 39].

La luz confinada en un resonador será reflejada por los espejos múltiples veces y debido a efectos de interferencia solo ciertas longitudes de onda será confinadas en el resonador. Las longitudes de onda que cumplan esto formarán patrones de interferencia que se repiten cada que la luz oscila, a esto estados se les conoce como modos propios del resonador [40] y hacen que el resonador sea estable.

Un resonador óptico se considera estable cuando un rayo lanzado de forma paralela al eje del resonador permanece dentro de éste después de un número infinito de oscilaciones. Un estado estacionario de distribución de campo dentro de un resonador ocurre cuando la amplitud y la fase de la radiación confinada es la misma después de una oscilación, estas dos condiciones se cumplen solo si la longitud de la cavidad es un número entero de la longitud de onda confinada [41]. Por lo tanto, para dos espejos paralelos separados por una cavidad de longitud L_0 e índice de refracción η , se tendrá un estado estacionario de distribución de campo para todas las longitudes de onda λ_q para las cuales se cumpla la siguiente condición

$$\lambda_q = \frac{2L_0\eta}{q}, \quad (2.12)$$

donde q es un número entero, llamado modo de orden axial y representa el número de mitades de longitud de onda que se encuentran confinadas.

La ecuación (2.12) se aplica a un tipo de resonador muy conocido, el resonador Fabry-Pérot [11], el cual fue desarrollado en el año 1899 y desde entonces ha sido ampliamente investigado tanto teórica como experimentalmente y ha sido usado en interferometría, fabricación de antenas y láseres [42, 43].

Tiempo de vida del fotón y factor de calidad

En el caso general, existirán pérdidas en la intensidad de la radiación confinada, las cuales se pueden asociar cavidades dispersivas o que los espejos tengan una reflectancia menor a la unidad. Bajo estas circunstancias se calcula la tasa de decaimiento de energía para un modo específico dentro de la cavidad. Así, sea I_0 la intensidad inicial del campo electromagnético incidente, R_1 y R_2 las reflectancia de los dos espejos que conforman el resonador y T_i la fracción de intensidad perdida por ciclo. De esta manera, la intensidad a un tiempo $t_1 = 2L_0/c$ después de una oscilación es

$$I(t_1) = R_1 R_2 (1 - T_i)^2 I_0, \quad (2.13)$$

y la intensidad después de m oscilaciones, a un tiempo $t_m = 2mL_0/c$ está dada por

$$I(t_m) = [R_1 R_2 (1 - T_i)^2]^m I_0. \quad (2.14)$$

Ahora, sea $\phi(t)$ el número total de fotones en la cavidad a un tiempo t . Dado que los modos propios mantienen la forma después de una oscilación se tienen que $I(t) \propto \phi(t)$, así de la ecuación (2.14) se puede escribir

$$\phi(t_m) = [R_1 R_2 (1 - T_i)^2]^m \phi_0, \quad (2.15)$$

donde ϕ_0 es el número de fotones iniciales en la cavidad. La última ecuación se puede escribir de la forma

$$\phi(t_m) = [\exp(-t/\tau_c)] \phi_0, \quad (2.16)$$

donde τ_c es una constante. Haciendo uso de que el número de fotones es proporcional a la intensidad y considerando m oscilaciones se puede escribir que

$$\exp(-2mL_0/c\tau_c) = [R_1 R_2 (1 - T_i)^2]^m, \quad (2.17)$$

de donde despejando τ_c

$$\tau_c = -\frac{2L_0}{c \ln[R_1 R_2 (1 - T_i)^2]}, \quad (2.18)$$

el cual se conoce como el tiempo de vida del fotón en una cavidad. Considerando que la ecuación (2.16) es válida para cualquier tiempo $t > 0$, se puede escribir que

$$\phi(t) \cong \exp(-t/\tau_c) \phi_0. \quad (2.19)$$

De este modo, se puede calcular la la distribución de campo y con ellos el espectro emitido de luz y su ancho de banda a altura media (FWHM), la cual está dada por la siguiente expresión

$$\Delta\nu_c = \frac{1}{2\pi\tau_c}. \quad (2.20)$$

Con el tiempo de vida del fotón se puede introducir el factor de calidad (Q). Para cualquier sistema resonante, el factor de calidad se puede definir de la siguiente manera: $Q = 2\pi(\text{energía almacenada}/\text{energía perdida en un ciclo de oscilación})$. Por lo tanto, Q se puede entender como una medida de la calidad del resonador ya que altos valores de Q implican bajas pérdidas en el sistema. En este caso, la energía almacenada es $\phi h\nu$ y la energía perdida en un ciclo es $h\nu(-d\phi/dt)(1/\nu) = -hd\phi/dt$, por lo que se tiene

$$Q = -2\pi\nu\phi/(d\phi/dt), \quad (2.21)$$

haciendo uso de las ecuaciones (2.19) y (2.20) y cambiando a longitud de onda, la ecuación (2.21) queda como

$$Q = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}. \quad (2.22)$$

Por lo que el factor de calidad Q puede ser interpretado como la relación entre la longitud de onda de resonancia y su ancho de banda.

Trabajos previos han reportado la fabricación de microcavidades o resonadores pasivos de PSi [44, 29, 45, 32] con factores de calidad entre 100 y 3000, siendo 3000 un factor de calidad alto para el material y adecuando para su aplicación en láseres.

Diferentes láseres se basan en microcavidades ópticas como resonadores pasivos, un ejemplo son los láseres emisores de superficie de cavidad vertical (VCSEL), que son un tipo de diodo láser basados en semiconductores cuyo medio activo está constituido por una o varias capas del material amplificador y encima y por debajo de ésta, reflectores de Bragg son situados como medio pasivo para obtener la retroalimentación, el haz del láser es ortogonal al plano de las capas. Las primeras investigaciones sobre VCSELS empezaron principalmente en el año 1965 con el trabajo de Melngailis acerca de inyección de plasma longitudinal en un láser de InSb, el cual estaba basado en una cavidad Fabry-Pérot [46] y varios trabajos posteriores [47, 48]. En 1989 J. Jewell fabricó un VCSEL de bajo umbral con emisión continua a temperatura ambiente [49] lo cual desencadenó un rápido progreso en la investigación de este tipo de láseres en los años siguientes [50]. Es ese sentido, los láseres VCSEL son un candidato para la implementación de las microcavidades de PSi.

2.2. Cristales fotónicos

El gran desarrollo de la tecnología electrónica moderna ha sido en gran parte al avance en la física de semiconductores, materiales cristalinos cuyas propiedades nos permiten el control y manipulación de los electrones. Un cristal es aquel material que tiene un patrón de difracción nítido y bien definido [51]. Normalmente, este tipo de materiales presentan una estructura atómica cuyos elementos se repiten de manera periódica en una red en el espacio, tal es el caso de los semiconductores como el Si y el Ge. El arreglo atómico de los semiconductores produce un potencial periódico efectivo por el cual los electrones se mueven, lo cual puede generar brechas de energía prohibidas, de tal forma que los electrones no se pueden propagar con ciertas energías ni en ciertas direcciones.

En analogía con un cristal atómico, un cristal fotónico (CF) es un arreglo ordenado compuesto por uno o varios materiales dieléctricos que se repiten periódicamente en el espacio. Así, en vez de generarse un potencial periódico efectivo, se tiene una función dieléctrica periódica por la cual los fotones viajan [52]. En este sentido, con un cristal fotónico se puede controlar y manipular

casi de la misma manera a los fotones que con un semiconductor a los electrones. Por lo tanto, los fotones pueden tener estructura de bandas, estados superficiales y estados de defectos localizados [1].

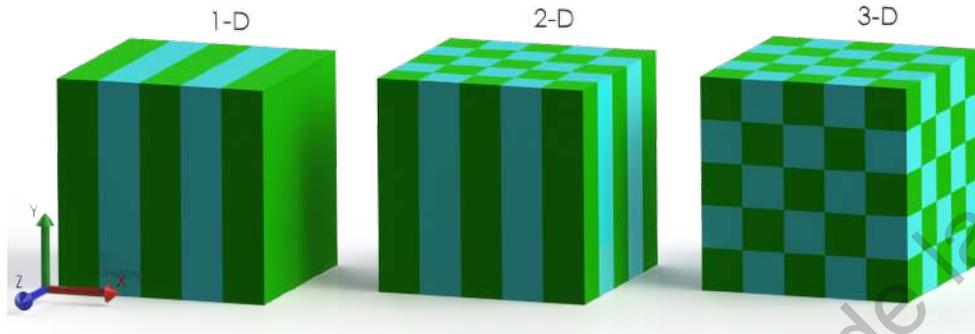


Figura 2.5: Esquemas de cristales fotónicos en 1-2-3D. Tomado y adaptado [1].

2.2.1. Estructura de bandas de un cristal fotónico en una dimensión

Al igual que en la física del estado sólido, es conveniente usar la estructura de bandas para obtener las propiedades generales de un CF y de igual manera poder diseñar y fabricar estos dispositivos. La estructura de bandas proporciona toda la información acerca del comportamiento de la radiación propagante a través de direcciones específicas dentro de un CF.

Para determinar la estructura de bandas de un CF se tiene que encontrar la relación de dispersión, que es la dependencia de la frecuencias propias (modos propios) en función del vector de onda. Para esto se usará el método de expansión en ondas planas (EOP) [53] para el cual hay que resolver un problema de valores propios con base en la ecuación de Helmholtz para el campo magnético dentro de una estructura dieléctrica infinita en una dimensión.

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\epsilon(x)} \frac{\partial}{\partial x} H(x) + \frac{\omega^2}{c^2} H(x) = 0. \quad (2.23)$$

Para esto, se considera el caso de un CF unidimensional conformado por una red infinita de capas dieléctricas, en la dirección x , con periodo a y capas de espesor d . La celda unitaria está compuesta por dos capa, cada una con constantes dieléctricas diferentes (figura 2.6).

Para resolver la ecuación 2.23 se utilizará el hecho de que la función de permitividad es periódica en el espacio. Se sabe que la función propia de una estructura infinita y periódica, es también infinita y periódica y se puede aplicar el teorema de Bloch [54] para la representación de las funciones propias del CF. Por lo que, las funciones propias, se pueden expresar como ondas planas multiplicadas por una función periódica correspondiente a la red de la estructura. Esta función tiene la siguiente forma [55]

$$H(x) = h_{k,n}(x)e^{ikx}, \quad (2.24)$$

donde $h_{k,n}(x)$ es la función con la periodicidad de la red, la cual corresponde al vector \vec{k} y el estado n . Para la computación de la estructura de bandas se tiene que hacer una expansión en series de

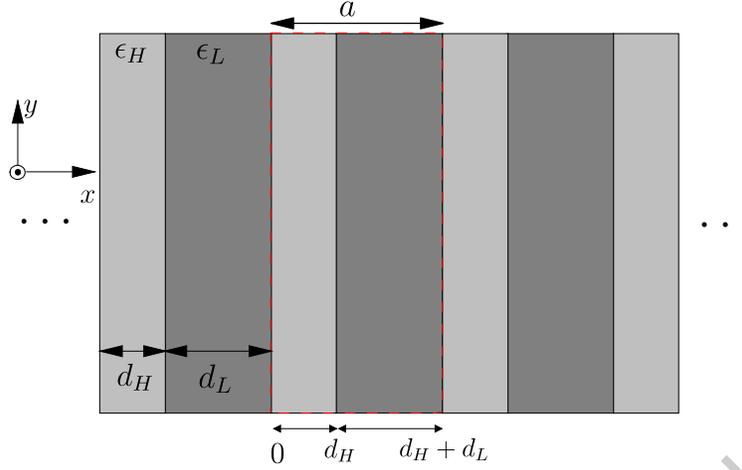


Figura 2.6: Esquemas de un cristal fotónico en 1D en la dirección x . Está compuesto de capas alternantes con constantes dieléctricas ϵ_H y ϵ_L , con espesores d_H y d_L respectivamente. Encuadrada en color rojo se muestra la celda unitaria del cristal con una longitud a .

Fourier de la ecuación (2.24) en los vectores recíprocos de la red, de tal forma que

$$H(x) = \sum_G h_{k,n}(G) e^{i(k+G)x}, \quad (2.25)$$

donde $h_{k,n}$ ahora también son coeficientes de la expansión de Fourier. Dado que la función dieléctrica es también infinita, se hace un expansión del mismo modo que para las funciones propias del campo. Por conveniencia se expande el inverso de la función dieléctrica

$$\frac{1}{\epsilon(x)} = \sum_{G'' \in G} \chi(G'') e^{iG''x}, \quad (2.26)$$

donde $\chi(G'')$ son los coeficientes de la expansión.

Una vez que se expandieron todas las funciones, la ecuaciones (2.25) y (2.26) se sustituyen en (2.23):

$$\sum_{G''} \frac{\partial}{\partial x} \chi(G'') e^{iG''x} \frac{\partial}{\partial x} \sum_{G'} h_{k,n}(G') e^{i(k+G')x} + \frac{\omega^2}{c^2} \sum_G h_{k,n}(G) e^{i(k+G)x} = 0; \quad (2.27)$$

Tomando en cuenta que $G = G' + G''$ [56, 57], se puede expresar la primera suma con un índice común con la segunda, de tal forma que

$$\sum_G \sum_{G'} \frac{\partial}{\partial x} \chi(G - G') e^{i(G-G')x} \frac{\partial}{\partial x} h_{k,n}(G') e^{i(k+G')x} + \frac{\omega^2}{c^2} \sum_G h_{k,n}(G) e^{i(k+G)x} = 0. \quad (2.28)$$

Aplicando la derivadas

$$\sum_G \sum_{G'} \chi(G - G') h_{k,n}(G') \frac{\partial}{\partial x} e^{i(G-G')x} (i(k + G')) e^{i(k+G')x} + \frac{\omega^2}{c^2} \sum_G h_{k,n}(G) e^{i(k+G)x} = 0, \quad (2.29)$$

$$\sum_G \sum_{G'} \chi(G - G') h_{k,n}(G') (i(k + G')) \frac{\partial}{\partial x} e^{i(k+G)x} + \frac{\omega^2}{c^2} \sum_G h_{k,n}(G) e^{i(k+G)x} = 0, \quad (2.30)$$

$$\sum_G \sum_{G'} \chi(G - G') h_{k,n}(G') (i(k + G')) (i(k + G)) e^{i(k+G)x} + \frac{\omega^2}{c^2} \sum_G h_{k,n}(G) e^{i(k+G)x} = 0. \quad (2.31)$$

Para simplificar la última ecuación se proyectará en la base $e^{i(k+G)x}$, multiplicando por una función ortogonal, así

$$\frac{1}{a} \int_0^a \sum_G \sum_{G'} \chi(G - G') h_{k,n}(G') ((k + G')(k + G)) e^{i(k+G)x} e^{-i(k+G_1)x} dx \quad (2.32)$$

$$= \frac{1}{a} \int_0^a \frac{\omega^2}{c^2} \sum_G h_{k,n}(G) e^{i(k+G)x} e^{-i(k+G_1)x} dx. \quad (2.33)$$

y por condiciones de ortogonalidad se puede omitir la suma en G , por lo tanto la ecuación (2.33) se convierte a

$$\sum_{G'} \chi(G - G') h_{k,n}(G') ((k + G')(k + G)) = \frac{\omega^2}{c^2} h_{k,n}(G). \quad (2.34)$$

La ecuación (2.34) se conoce como la ecuación maestra para un CF en una dimensión. Cabe notar que no depende de las coordenadas, solamente de los vectores recíprocos de la red. Además, la ecuación maestra es un sistema de ecuaciones lineales infinito con infinitas incógnitas. Este sistema se puede truncar para generar un problema de valores y vectores propios

$$Ah(G) = \frac{\omega^2}{c^2} h(G), \quad (2.35)$$

de donde la matriz A tiene la siguiente forma

$$A = \begin{pmatrix} A_{G_1, G'_1} & A_{G_2, G'_1} & \cdots & A_{G_N, G'_1} \\ A_{G_1, G'_2} & A_{G_2, G'_2} & \cdots & A_{G_N, G'_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{G_1, G'_N} & A_{G_2, G'_N} & \cdots & A_{G_N, G'_N} \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

donde cada valor corresponde a

$$A_{G, G'} = \chi(G - G') ((k + G')(k + G)). \quad (2.37)$$

El conjunto de valores para G debe ser el simétrico respecto a cero. El conjunto para G' debe ser el mismo que para G .

De esta manera el único valor desconocido son los coeficientes $\chi(G - G')$. Para obtenerlos se toma en cuenta la expansión de la función dieléctrica para un CF en una dimensión, la cual tiene la forma

$$\frac{1}{\epsilon(x)} = \sum_G \chi(G) e^{iGx} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \chi_l e^{ilG_0x}, \quad (2.38)$$

donde l es el número ($l \in Z$) de periodos en la red recíproca y G_0 es la longitud del vector recíproco primitivo de la red. Los coeficientes χ_l pueden ser expresados de la siguiente manera

$$\chi_l = \frac{1}{a} \int_0^a \frac{1}{\epsilon(x)} e^{-ilG_0x} dx, \quad (2.39)$$

y para el caso de la celda unitaria mostrada en la figura 2.6 la función dieléctrica toma valores concretos en función del intervalo, por lo que se puede definir como

$$\frac{1}{\epsilon(x)} = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon_H} & x = (0 + al; d_H + la) \\ \frac{1}{\epsilon_L} & x = (d_H + la; a + la) \end{cases} \quad (2.40)$$

Por lo que la ecuación (2.42) se puede expresar como

$$\chi_l = \frac{1}{a} \left[\int_0^{d_H} \frac{1}{\epsilon_H} e^{-ilG_0x} dx + \int_{d_H}^a \frac{1}{\epsilon_L} e^{-ilG_0x} dx \right]. \quad (2.41)$$

La ecuación (2.41) permite obtener el coeficiente de la expansión para cada valor del vector recíproco dentro del conjunto seleccionado. El método de EOP es ampliamente usado ya que el tiempo de cómputo es muy bajo y permite la simulación tanto de la estructura de bandas, como la distribución de campo para diversos CF en una y dos dimensiones como son puntos de defecto, guías de onda y fibras ópticas [53, 58, 59]. Sin embargo, este método también tiene ciertas desventajas, como la imposibilidad de tratar materiales dispersivos (índice de refracción variante) o con pérdidas (absorción). Por otro lado, existen otros métodos para la simulación de la estructura de bandas basados en diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD) y en la matriz de transferencia que sí pueden incluir estos efectos [60, 61, 62, 63].

En la figura 2.7a se observa la estructura de bandas de un cristal fotónico en la zona extendida de Brillouin. Los valores utilizados para la simulación fueron $d_H = 100$ nm, $d_L = 130.3$ nm para los espesores e índices de refracción $\eta_H = 2$, $\eta_L = 1.5$ recordando que $\eta^2 = \epsilon$, para medios sin absorción. Se puede apreciar la aparición de brechas prohibidas en la estructura de bandas marcadas por las zonas sombreadas, lo cual da origen a lo que se le conoce como bandgap fotónico (PBG), que es una región de frecuencias las cuales no se pueden propagan a través de la estructura. La figura 2.7b muestra la reflectancia del cristal fotónico correspondiente a la estructura de bandas y se puede ver cómo las frecuencias dentro del PBG son totalmente reflejadas por la estructura.

En la figura 2.7c se observa claramente que en el PBG aparecen en el borde de la zona de Brillouin, en $k_x a = \pi$ entre las bandas $n = 1$ y $n = 2$. Los modos normales en el borde de la zona de Brillouin tienen una longitud de $2a$ (dos veces el periodo de la celda unitaria), y existen dos formas de que estos modos se distribuyan en la estructura del cristal: posicionar los nodos en las regiones ϵ_H o en las regiones ϵ_L . Se puede demostrar que en el primer caso, los modos de baja frecuencia concentran la energía las regiones con constante dieléctrica alta, mientras que los modos con frecuencias altas concentran la energía en las regiones con constante dieléctrica baja. Es por esto que existe una diferencia de frecuencias entre estos dos casos [1]. Esto implica que entre mayor sea la diferencia entre las constantes dieléctricas de las capas que componen al CF, mayor será el PBG.

Como se mencionó antes, con el método de EOP se pueden simular puntos de defecto, es decir la introducción de una capa de defecto, o cavidad en la estructura de un CF simple (resonador

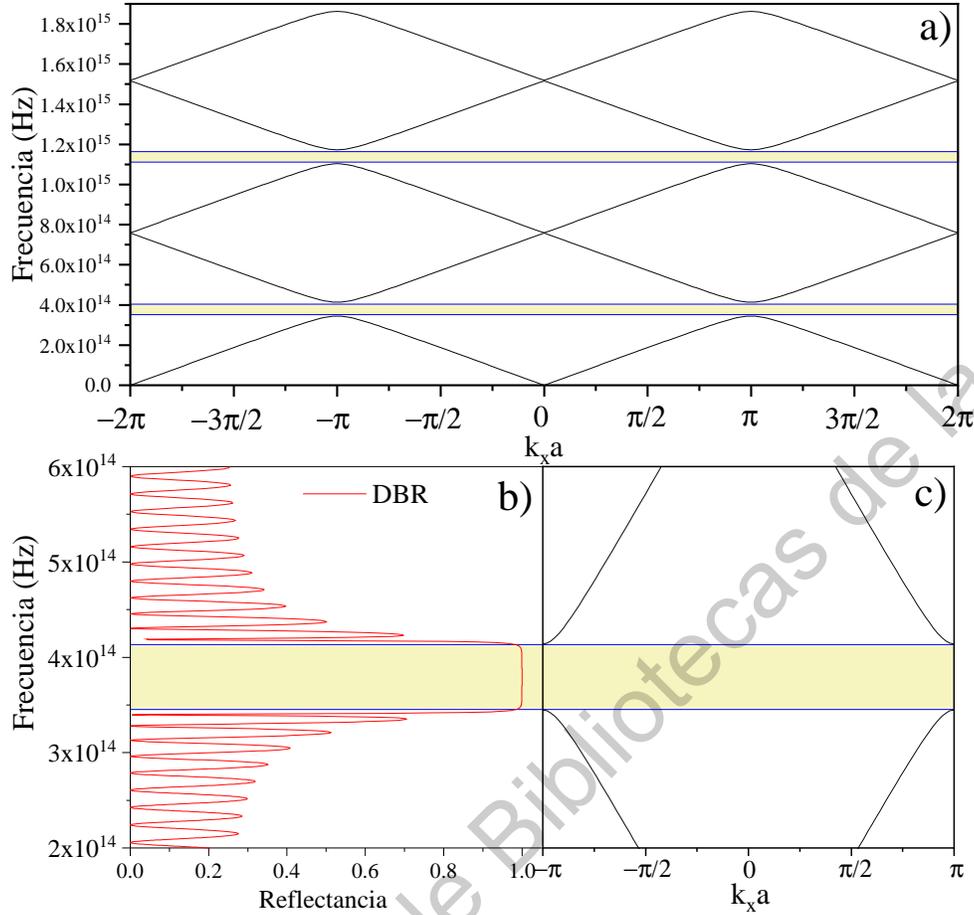


Figura 2.7: **a)** Estructura de bandas en la zona extendida de Brillouin para un CF simulado con $d_H = 100$ nm, $d_L = 130.3$ nm e índices de refracción $\eta_H = 2$, $\eta_L = 1.5$. **b)** Espectro de reflectancia del CF. **c)** Estructura de bandas en la primera zona de Brillouin.

Fabry-Pérot). Esta cavidad rompe la periodicidad de la red lo que puede generar modos de defecto localizados dentro el PBG que decaen exponencialmente al propagarse por todo el cristal, lo que quiere decir que el PBG no se ve afectado. Los sistemas multicapa a cada lado del defecto actúan como espejos para el modo de defecto, lo que causa que la luz quede confinada en la cavidad entre los dos espejos. Estos modos pueden tomar valores discretos de frecuencia y están descritos por la ecuación (2.12).

Para la simulación de CF con capas de defectos se hace uso del método de la supercelda [64, 65], el cual consiste en considerar como celda unitaria mucho más grande que para un CF perfecto, y que a su vez contenga al defecto centrado a la mitad (ver figura 2.8). Esta celda unitaria simula un CF con infinitud de defectos, sin embargo, entre más periodos regulares se consideren, más cercana será la simulación a un CF con un solo defecto. Para este caso la expansión de Fourier para la

función dieléctrica toma la forma

$$\chi_l = \frac{1}{D} \int_{-D/2}^{D/2} \frac{1}{\epsilon(x)} e^{-ilG_0x} dx, \quad (2.42)$$

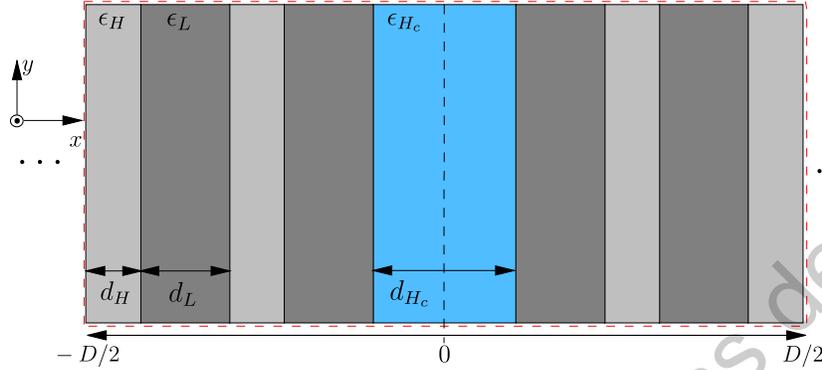


Figura 2.8: Supercelda para la simulación de la estructura de bandas de un CF con un defecto.

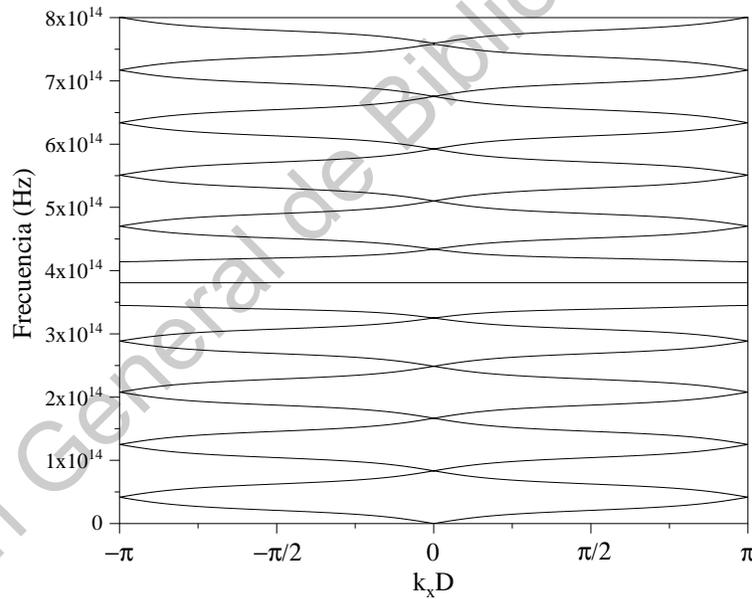


Figura 2.9: Estructura de bandas de un CF con un defecto simulado con $d_H = 100$ nm, $d_L = 130.3$ nm, $d_{H_c} = 200$ nm e índices de refracción $\eta_H = \eta_{H_c} = 2$, $n_L = 1.5$. Encuadrada en color rojo se muestra la celda unitaria del cristal con una longitud D .

La figura [2.9](#) muestra la estructura de bandas de un CF en una dimensión con un defecto. Aunque el PBG permanece inalterado, es clara la formación de un nuevo modo permitido dentro de éste. El índice de la capa de defecto es el mismo que el de la capa ϵ_H pero su espesor fue

modificado para generar un solo modo de defecto de acuerdo con la ecuación (2.12), por lo que el espesor de la cavidad es de $d_{H_c} = 200$ nm.

En la figura 2.10 se observa la respuesta óptica en reflectancia del CF con un defecto y es comparada con la estructura de bandas en el mismo rango de frecuencias. Se puede apreciar que el PBG así como el modo de defecto concuerdan en ambas simulaciones.

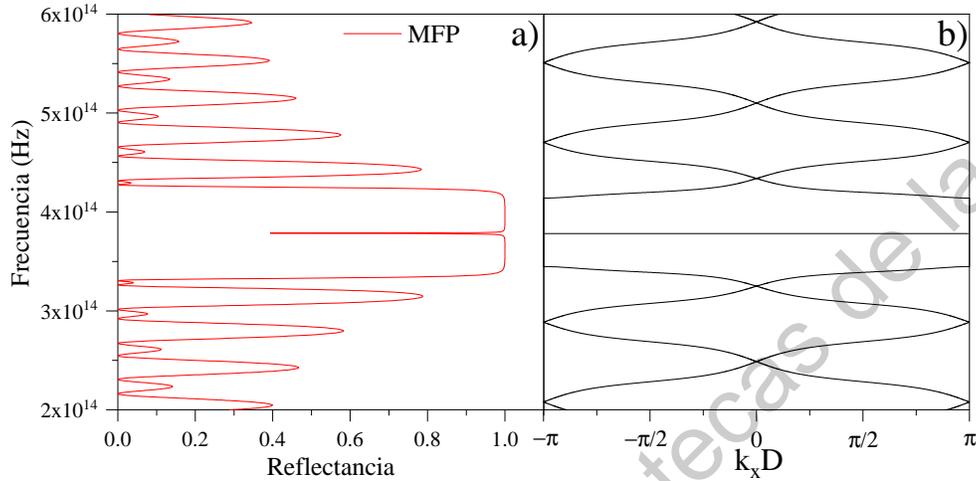


Figura 2.10: **a)** Espectro de reflectancia del CF con un defecto. **b)** Estructura de bandas en la primera zona de Brillouin. El modo de defecto en la reflectancia concuerda con el de la estructura de bandas.

Conocer la estructura de bandas es importante ya que contiene toda la información acerca del comportamiento de la radiación propagante a través de un CF, lo cual toma relevancia al diseñar y fabricar dispositivos ópticos como lo son los resonadores ópticos pasivos utilizados en la construcción de láseres.

2.2.2. Simulación de la respuesta óptica de cristales fotónicos basados en PSi

Teoría de medio efectivo

El PSi es un material nanocompuesto y nanoestructurado el cual se obtiene comúnmente mediante anodización electroquímica en soluciones acuosas a base de ácido fluorhídrico, además, es posible modular sus propiedades a través de la modificación de los parámetros experimentales como la densidad de corriente y el tiempo de anodizado, los cuales modulan la porosidad y el espesor de la capa porosa respectivamente [2]. Las propiedades ópticas de películas delgadas de PSi pueden ser descritas usando reglas de medio efectivo. Estas reglas toman en consideración una mezcla entre dos o más materiales (una matriz de material con incrustaciones de los demás materiales dentro de ella) para definir una función de permitividad eléctrica efectiva (figura 2.11). Las reglas más comunes para describir las propiedades ópticas del PSi son Maxwell-Garnet (MG) [66, 67], Bruggeman [68] (BR) y Landau-Looyenga-Lifshitz (LLL) [69]. En la regla de MG, se consideran esferas con volumen pequeño como incrustaciones. Éstas presentan una polarizabilidad específica y pueden estar distribuidas uniformemente en una red o distribuidas aleatoriamente en un volumen fijo, esta

regla funciona mejor en el régimen diluido. La regla de BR considera esferas como incrustaciones y permite sistemas conformados por dos o más componentes. Esta regla es simétrica cuando los componentes de la matriz y las incrustaciones son intercambiados, por lo que ofrece mejores resultados fuera del régimen diluido. La regla LLL es también una simétrica y considera una mezcla de partículas con formas desconocidas o irregulares, con constantes dieléctricas cercanas entre sí y pequeñas. Las ecuaciones (2.43) a (2.45) describen la función dieléctrica efectiva para cada modelo respectivamente.

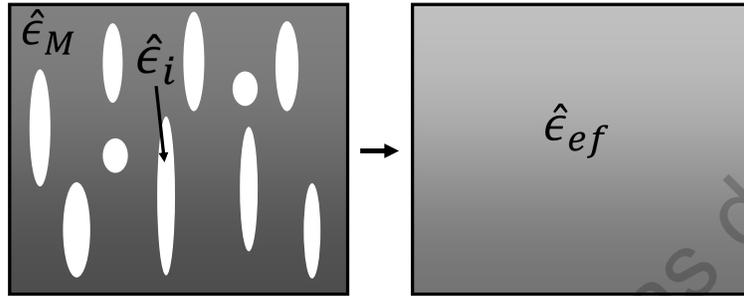


Figura 2.11: Representación gráfica de la aproximación de las propiedades eléctricas de una heteroestructura mediante EMA.

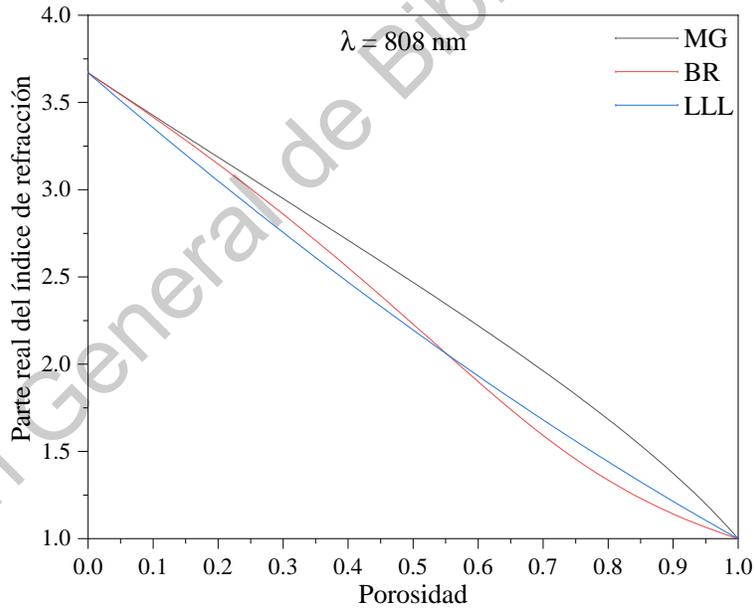


Figura 2.12: Índice de refracción en función de la porosidad del c-Si a una longitud de onda de $\lambda = 808$ nm.

$$\left(\frac{\hat{\epsilon}_{ef} - \hat{\epsilon}_M}{\hat{\epsilon}_{ef} + 2\hat{\epsilon}_M} \right) = p \left(\frac{\hat{\epsilon}_i - \hat{\epsilon}_M}{\hat{\epsilon}_i + 2\hat{\epsilon}_M} \right), \quad (\text{MG}) \quad (2.43)$$

$$(1 - p) \left(\frac{\hat{\epsilon}_M - \hat{\epsilon}_{ef}}{\hat{\epsilon}_M + 2\hat{\epsilon}_{ef}} \right) = -p \left(\frac{\hat{\epsilon}_i - \hat{\epsilon}_{ef}}{\hat{\epsilon}_i + 2\hat{\epsilon}_{ef}} \right), \quad (\text{BR}) \quad (2.44)$$

$$(\hat{\epsilon}_{ef})^{1/3} = p(\hat{\epsilon}_i)^{1/3} + (1 - p)(\hat{\epsilon}_M)^{1/3}, \quad (\text{LLL}) \quad (2.45)$$

donde $\hat{\epsilon}_{ef}$ es la constante dieléctrica efectiva de la mezcla, $\hat{\epsilon}_M$ es la constante dieléctrica de la matriz de material, en este caso c-Si, $\hat{\epsilon}_i$ es la constante dieléctrica de las incrustaciones (aire) y p es la fracción de incrustaciones en la matriz (porosidad). De esta manera, las constantes ópticas del PSi quedan determinadas [70]. La figura 2.12 muestra el comportamiento de la parte real del índice de refracción para PSi en función de la porosidad para las tres reglas antes mencionadas para un longitud de onda fija de $\lambda = 808$ nm. Se observa que los posibles índices de refracción que puede tener la capa poroso se encuentran entre el índice de refracción del c-Si y el del aire. Varios trabajos han demostrado que la regla de medio efectivo de LLL es la más efectiva para describir las propiedades ópticas del PSi [70, 3, 2]. La figura 2.13 muestra el cambio en el índice de refracción del c-Si en función de la porosidad y la longitud de onda, en un rango desde 210 nm a 1100 nm, utilizando la regla de LLL. De igual manera que se observa en la figura 2.12 el índice de refracción se encuentra entre el índice de refracción del c-Si y el aire.

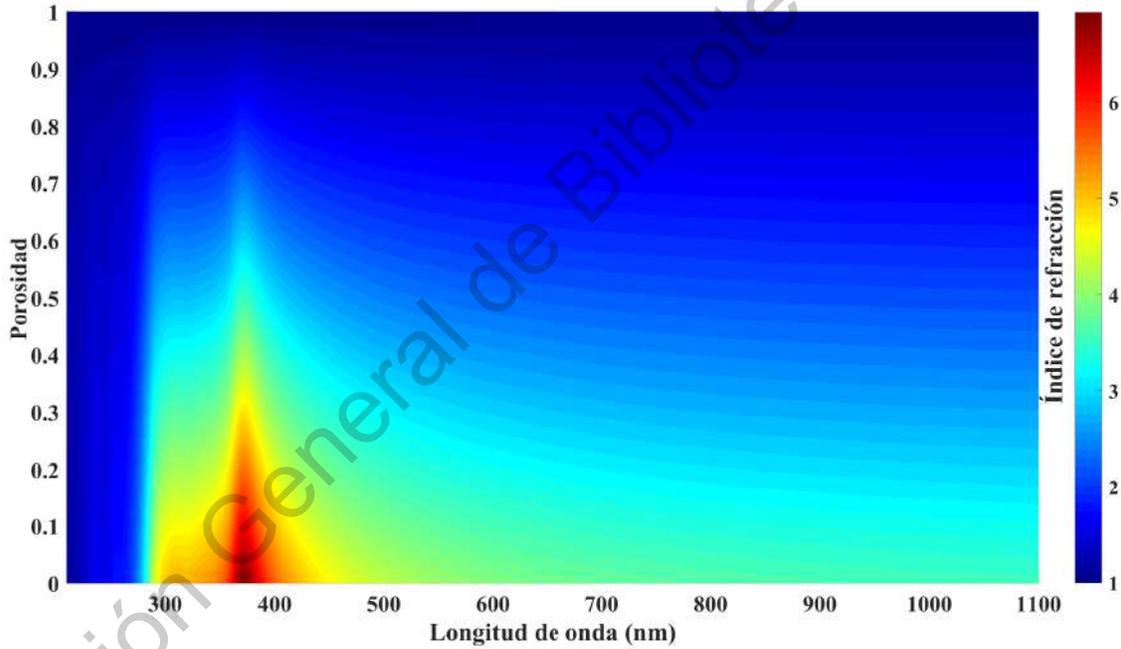


Figura 2.13: Índice de refracción en función de la porosidad y la longitud de onda para el c-Si usando la regla de LLL.

Propagación de ondas electromagnéticas en películas delgadas

Para la simulación de la respuesta óptica de cristales fotónicos basados en PSi se utiliza el método de la matriz de transferencia (TMM) [71, 72], el cual considera un sistema de n capas con $n + 1$ interfaces. Cada capa es considerada no magnética con un índice de refracción complejo de

la forma $\hat{N}_k = \eta_k + i\kappa_k$ y un espesor d_k . Este método permite la caracterización de cada capa en función de su espesor y los coeficientes de Fresnel, correspondientes a cada interface, resolviendo las condiciones de frontera adecuadas para el campo electromagnético.

En este método la respuesta óptica total del sistema está dada por la matriz de transferencia, la cual está definida de la siguiente manera

$$\mathbf{S} = \mathbf{W}_{01}\mathbf{U}_1\mathbf{W}_{12}\mathbf{U}_2\dots\mathbf{U}_k\mathbf{W}_{k,k+1}\dots\mathbf{U}_n\mathbf{W}_{n,n+1} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{bmatrix}, \quad (2.46)$$

donde \mathbf{U}_k es la matriz de fase que caracteriza a k-ésima capa en función de su espesor e índice de refracción y se representa de la siguiente manera

$$\mathbf{U}_k = \begin{bmatrix} \exp\left(-\frac{2\pi i}{\lambda}\hat{N}_k d_k \cos\theta_k\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(\frac{2\pi i}{\lambda}\hat{N}_k d_k \cos\theta_k\right) \end{bmatrix}. \quad (2.47)$$

Por otro lado, $\mathbf{W}_{k,k+1}$ es la matriz de propagación y caracteriza a la interfaz que se encuentra entre la capa k y $k+1$ en función de los coeficientes de Fresnel de reflexión y transmisión para dicha interfaz, la cual se define como

$$\mathbf{W}_{k,k+1} = \frac{c_{k,k+1}}{t_{k,k+1}} \begin{bmatrix} 1 & -r_{k+1,k} \\ r_{k,k+1} & t_{k,k+1}t_{k+1,k} - r_{k,k+1}r_{k+1,k} \end{bmatrix}, \quad (2.48)$$

donde $c_{k+1,k}$ es el factor de polarización y está definido como

$$c_{k+1,k} = \begin{cases} \frac{\cos\theta_k}{\cos\theta_{k+1}} & \text{para polarización p,} \\ 1 & \text{para polarización s.} \end{cases} \quad (2.49)$$

En la ecuación (2.48) $r_{k,k+1}$ representa el coeficiente de reflexión de Fresnel correspondiente a la interface que se encuentra entre la capa k y la capa $k+1$. De la misma manera $t_{k,k+1}$ representa el coeficiente de transmisión de Fresnel para la misma interface. Este formalismo permite tomar en cuenta la rugosidad interfacial entre las capas de los CF, esto se hace introduciendo los coeficiente modificados de Fresnel [3].

Así, en función de la ecuación (2.46) se obtienen los coeficientes de reflexión y de transmisión totales del sistema multicapa los cuales son

$$R = rr^* = \left(\frac{s_{21}}{s_{11}}\right) \left(\frac{s_{21}}{s_{11}}\right)^*, \quad (2.50)$$

$$T = tt^* = \left(\frac{1}{s_{11}}\right) \left(\frac{1}{s_{11}}\right)^*. \quad (2.51)$$

De esta manera, la respuesta óptica del sistema multicapa queda determinada en función de los espesores de las capas y sus índices de refracción.

Reflectores de Bragg

Un reflector de Bragg es un cristal fotónico que consiste de una secuencia de dos capa alternantes (periodo) de materiales dieléctricos diferentes que se repite en el espacio (ver figura 2.14). Cada una de las dos capa tienen un índice de refracción y espesores diferentes las cuales deben cumplir con la condición de un cuarto de longitud de onda [73] (ecuación (2.52)) en la cual el camino óptico de las capas que componen el CF debe ser igual a un cuarto de la longitud de onda central de resonancia del PBG (λ_0).

$$\eta_H d_H = \eta_L d_L = \frac{\lambda_0}{4}. \quad (2.52)$$

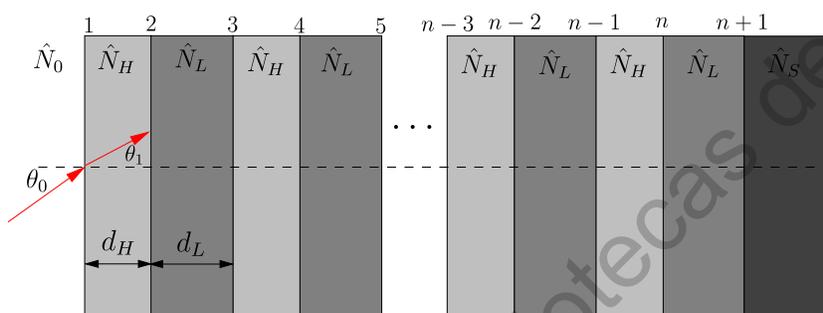


Figura 2.14: Diagrama de un DBR basado en PSi.

en el caso de un DBR basado en PSi, los subíndices H y L representan las capas con índice de refracción alto (baja porosidad) y bajo (alta porosidad) respectivamente (ver figura 2.14). Cada interface en un DBR contribuye con procesos de reflexión y transmisión. Dichas reflexiones resultan ser de la mitad de la longitud de onda de centrado, lo cual causa una interferencia constructiva y genera un PBG de máxima reflexión en su respuesta óptica. La respuesta óptica de un reflector de Bragg está determinada principalmente por la longitud de onda de centrado (λ_0), el contraste de índices de refracción el cual determina el ancho de banda ($\Delta\lambda$) del PBG, el cual se define de la siguiente manera

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0} = \frac{\pi}{2} \left(\frac{1}{\cos^{-1}(\rho)} - \frac{1}{\cos^{-1}(-\rho)} \right), \quad (2.53)$$

donde

$$\rho = \frac{\eta_H - \eta_L}{\eta_H + \eta_L}, \quad (2.54)$$

es el contraste entre porosidades. Y por último, por el número de periodos de capas que conforman al DBR, ya que hay más interfaces que contribuyen a la formación del PBG. Haciendo uso del método de la TMM y la teoría de medio efectivo, la figura 2.15 muestra la simulación de la respuesta óptica de un DBR basado en PSi centrado en $\lambda_0 = 770$ y con un ancho de banda de aproximadamente $\Delta\lambda = 160$ nm. Se observa que a medida que el número de periodos aumenta, el PBG está más definido y su reflectancia aumenta.

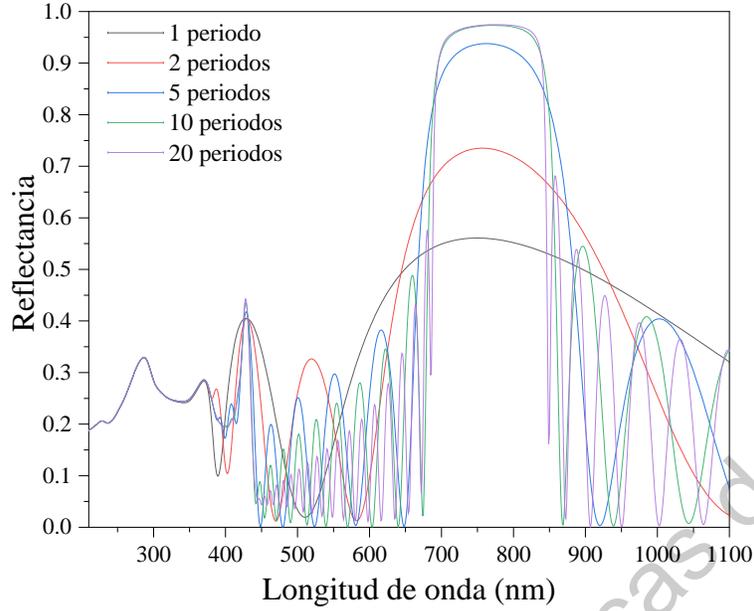


Figura 2.15: Reflector de Bragg simulado con diferente cantidad de periodos. Los parámetros de simulación son: espesores $d_H = 100$ nm, $d_L = 133$ nm y porosidades de $p_H = 0.580$ y $p_L = 0.775$.

Microcavidades Fabry-Pérot

Una microcavidad Fabry-Pérot (MFP) basada en PSi básicamente consiste en agregar una capa de defecto con características específicas a la estructura de un reflector de Bragg mostrada en la sección anterior. Esto para crear un modo de defecto en el PBG y así obtener un resonador pasivo basado en PSi. La figura 2.16 muestra un diagrama esquemático de la estructura general de una MFP basada en PSi.

Este modo de defecto puede ser modificado en función de su espesor y la porosidad, en la figura 2.17a se observa la respuesta óptica de una MFP basada en el DBR de la figura 2.15. La estructura consiste es dos conjuntos de seis periodos a cada lado de la capa de defecto. El espesor de la capa de defecto es de $d_c = 182$ nm y la porosidad de $p_c = 0.58$ para producir un modo de defecto en 770 nm.

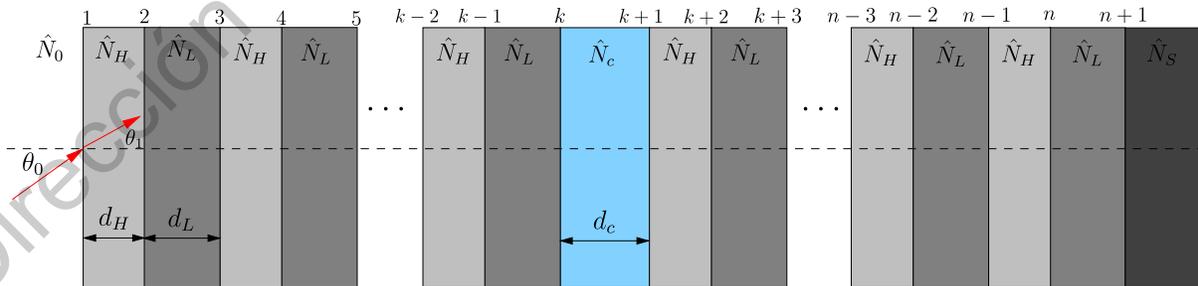


Figura 2.16: Diagrama de una MFP basada en PSi. Tomado y adaptado de [2].

Hay que tener en cuenta que los efectos de absorción volumétrica y efectos dispersivos atenúan la cantidad de radiación que llega a la cavidad reduciendo así la calidad del resonador [3] [2]. Estos efectos se pueden ver en la figura 2.17b donde se grafica la respuesta óptica de la MFP de la figura 2.17a en función de la cantidad de periodos antes y después de la cavidad. Se observa que al comienzo, a medida que se van añadiendo más periodos, el modo de defecto se define de mejor manera, sin embargo al aumentar cada vez más la cantidad de periodos antes de la capa de defecto, el modo se va atenuando cada vez más, debido a que la contribución que tiene respecto a todo el conjunto de capas empieza a ser despreciable. Es por esta razón que elegir una secuencia de capas que maximice la calidad (factor de calidad) del resonador es importante.

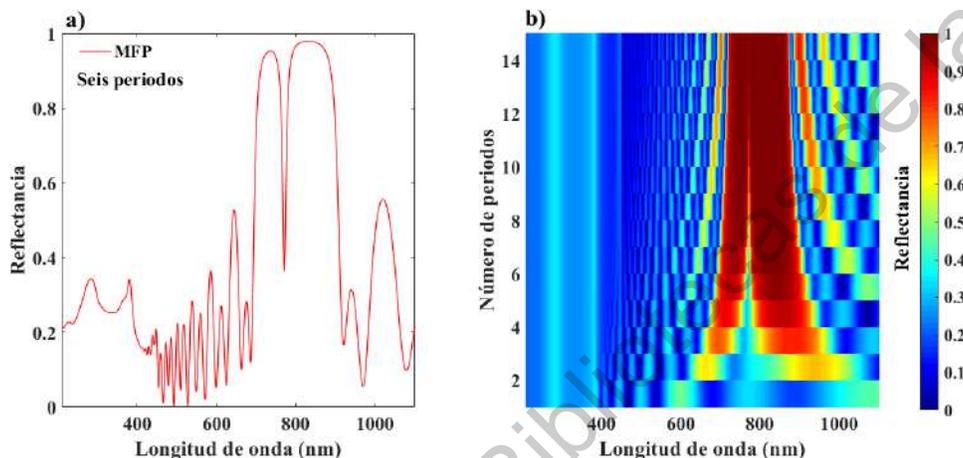


Figura 2.17: a) MFP basada en P*Si* con una capa de defecto de $d_c = 182$ nm de espesor y una porosidad de $p_c = 0.58$. b) Respuesta óptica de una MFP en función de la cantidad de periodos antes y después de la capa de defecto.

2.3. Formación del silicio poroso

Un material sólido poroso se define como un sólido con poros, los cuales pueden ser cavidades, canales o intersticios que son más profundos que anchos [74]. La gran complejidad y variedad de los materiales porosos ha dado lugar a una categorización recomendada de la IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) para sus estructuras [75] la cual se muestra en la tabla 2.1

| Término | Diámetro del poro |
|-----------|-------------------|
| Nanoporo | Hasta 100 nm |
| Macroporo | Mayor que 50 nm |
| Mesoporo | De 2 a 50 nm |
| Microporo | Menor a 2 nm |

Tabla 2.1: Nomenclatura para las categorías de poros en silicio.

El silicio poroso es un material nanoestructurado que consiste de una matriz de silicio cristalino con agujeros, cuyos diámetros de poro abarcan desde microporos hasta macroporos. Éste fue descu-

bierto en 1956 por A. Uhler [76] que trabajaba en un método para electropulir obleas de silicio con electrolitos basados en ácido fluorhídrico. Se observó que el electropulido ocurría solo después de una densidad corriente crítica, a partir de la cual la oblea de silicio se tornaba de distintos colores que dependían de la densidad de corriente aplicada, composición del electrolito y temperatura de operación [77].

Estos descubrimientos no fueron tomados en cuenta sino hasta las décadas de 1970 y 1980. En 1971, usando la propiedad de aislamiento total del silicio poroso oxidado, se usaron capas de PSi como aislantes en circuitos integrados, siendo esta la primera aplicación en el área electrónica [78]. En la década de 1980 se introdujo la tecnología de silicio-aislante en circuitos integrados (Metal-Oxide-Semiconductor (MOS)) [79]. Sin embargo, solo hasta el año de 1990 el interés creció exponencialmente, cuando se descubrieron efectos de confinamiento cuántico en PSi [80] y se reportó emisión de luz eficiente a temperatura ambiente [21] debido a su gran área superficial y tamaño de la nanoestructura (nm). Estos descubrimientos aceleraron la investigación en PSi dado su potencial en aplicaciones optoelectrónicas.

Actualmente existen varias rutas de obtención de PSi. La tabla 2.2 muestra algunas de las técnicas de fabricación más comunes, así como el rango de porosidad resultante. Históricamente, la técnica más usada de obtención de PSi es la anodización electroquímica, debido a que permite fabricar desde PSi microporoso hasta macroporoso al variar los parámetros extrínsecos e intrínsecos e la reacción electroquímica [81, 82]. Las características del PSi, como porosidad y morfología dependen en gran medida de la técnica de fabricación y la elección de ésta dependerá del área de aplicación.

| Técnica de fabricación | Porosidad |
|---|------------------------|
| Anodización | Micro/Meso/Macroporoso |
| Fotograbado | Mesoporoso |
| Grabado químico asistido por iones metálicos (MACE) | Mesoporoso |
| Grabado galvánico | Mesoporoso |
| Grabado de vapor | Mesoporoso |
| Reducción magnetotérmica de sílice | Micro/Mesoporoso |
| Fresado/sinterizado | Macroporoso |
| Grabado asistido por nanopartículas de platino | Mesoporoso |

Tabla 2.2: Técnicas de fabricación de PSi.

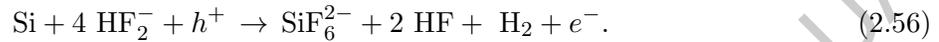
La porosificación de la superficie de un sustrato de silicio se denomina generalmente “anodización” y se produce cuando el sustrato está polarizado anódicamente en una solución electrolítica generalmente a base de flúor. El electrolítico más utilizado es una solución de ácido fluorhídrico (HF) más un surfactante. La porosidad y morfología obtenidas en esta técnica depende de la resistividad de la oblea, la densidad de corriente aplicada, la composición del electrolito (relación HF/surfactante), condiciones de iluminación, temperatura y tiempo de anodización [83].

Esta técnica involucra diversas reacciones químicas superficiales descritas en las ecuaciones (2.55) y (2.56). La ecuación (2.55) describe la remoción de la capa de óxido nativo la cual ocurre sin la inyección de corriente. En esta reacción se diluye el óxido de silicio formando hexafluoruro de silicio,

hidrógeno y agua [84].



Para la disolución del Si en la región de generación de poros, el sustrato de Si es utilizado como ánodo de sacrificio, y generalmente platino, como un cátodo resistente al ácido fluorhídrico, . Al hacer fluir una corriente a través de este circuito, los iones F^- se sitúan en la superficie del sustrato del Si y reaccionan con éste. La reacción que tiene lugar es la siguiente [85]



Al inyectar cargas positivas (huecos) del Si a la interface Si/electrolito, los enlaces Si-Si se debilitan y se producen disociaciones en el electrolito lo cual genera la producción de un enlace Si-F en la superficie del Si. Al producirse un enlace Si-F se libera un electrón el cual desencadena un nuevo ataque. Los átomos restantes de Si son hidrogenados y se libera hidrógeno gaseoso, de este modo la reacción vuelve al punto inicial y continuará hasta la inyección de una nuevo hueco [86], la figura 2.18 muestra un diagrama simple del proceso de dilución del c-Si. La nucleación de poros ocurre de manera aleatoria en la superficie del Si pero uniformemente distribuida, siempre y cuando la superficie no haya sido pretratada o modificada. La hidrogenación de la superficie del Si puede ser considerada como un método de pasivación de las paredes de los poros, por lo que la disolución se favorece en la interface electrolito/c-Si. Por lo tanto, una vez formados los poros no se modifican [84]. Este fenómeno se conoce como formación autolimitada de poros.

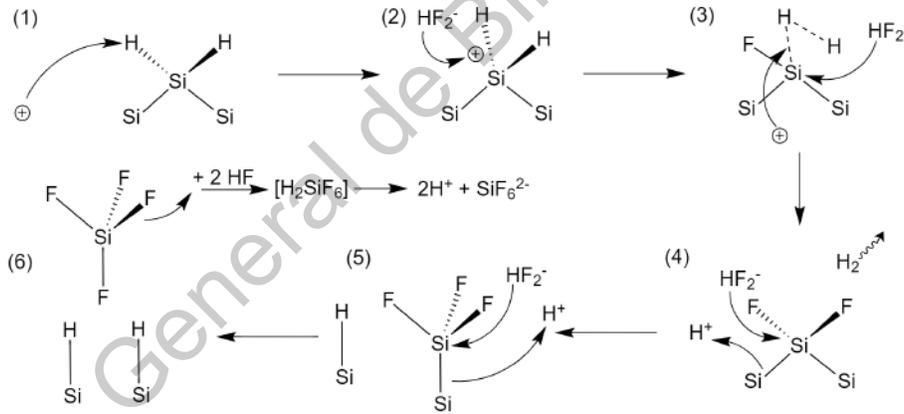


Figura 2.18: Diagrama simple de la reacción electroquímica que tiene lugar en la formación de PSi.

La formación de poros está caracterizada por la intensidad de corriente que fluye a través del sistema. La figura 2.19 muestra las curvas características corriente-voltaje (J - V) de la celda electroquímica para silicio tipo p y tipo n [87]. Se puede observar que la interface electrolito/semiconductor tiene un comportamiento similar a un diodo Schottky.

De igual manera se pueden ver dos picos que delimitan la región de formación regular de poros y electropulido. El pico (J_{OX}) es el valor de corriente donde inicia la región reacción de oxidación la cual conlleva el electropulido. Para silicio tipo n es necesario que la reacción se lleve a cabo en

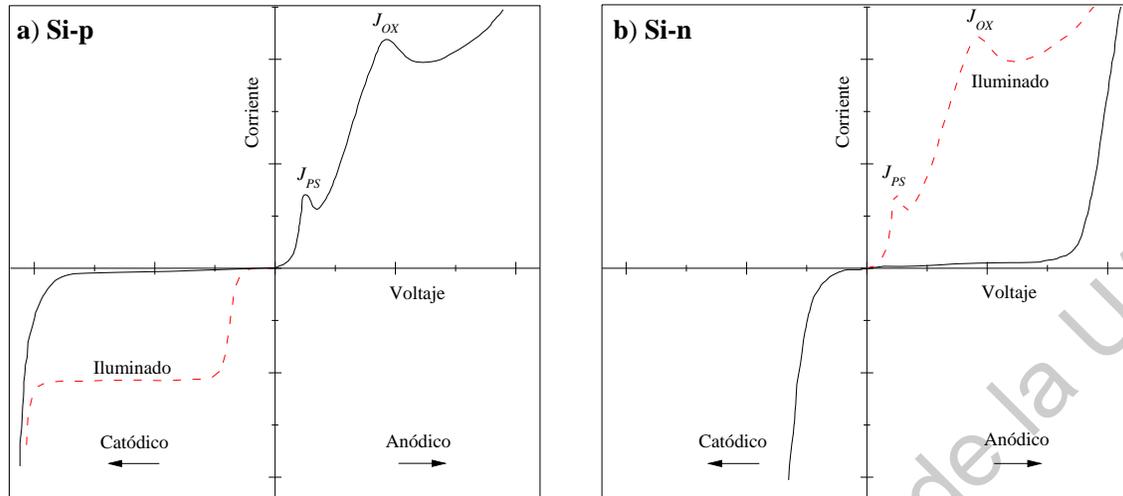


Figura 2.19: Curva corriente voltaje (J - V) característica para la formación de PSi mediante anodización química para a) silicio tipo p y b) para silicio tipo n .

presencia de luz con energía mayor a la energía de la brecha prohibida del Si (E_g). Esta diferencia ocurre ya que los huecos formados por la radiación reaccionan con los iones F^- .

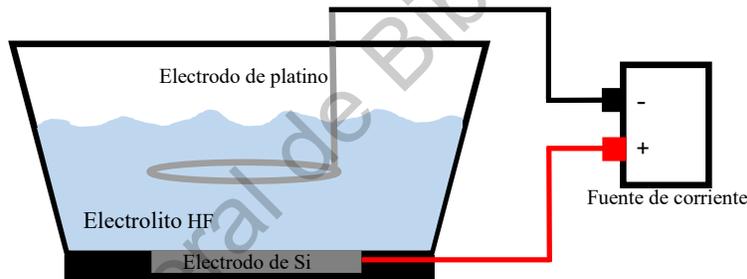


Figura 2.20: Diagrama simple de una celda electroquímica de dos electrodos utilizada para la fabricación de PSi.

| Parámetro (\uparrow) | Porosidad | Vel. de crecimiento | Densidad de corriente crítica |
|--------------------------|--------------|---------------------|-------------------------------|
| Concentración del HF | \downarrow | \downarrow | \uparrow |
| Densidad de corriente | \uparrow | \uparrow | - |
| Tiempo de anodización | \uparrow | casi constante | - |
| Temperatura | - | - | \uparrow |
| Nivel de dopaje tipo p | \downarrow | \uparrow | - |
| Nivel de dopaje tipo n | \uparrow | \uparrow | - |

Tabla 2.3: Parámetros de fabricación y sus efectos en la formación de PSi.

Como se mencionó anteriormente, en una reacción electroquímica se necesitan al menos dos elec-

trodos, uno que suministra electrones a la solución (el cátodo) y otro que remueve electrones de la solución (el ánodo). La figura 2.20 se muestra un diagrama esquemático de una celda electroquímica simple para la fabricación de PSi que consta de un recipiente resistente al HF, dos electrodos y una fuente de corriente. El electrodo de silicio se le conoce como el electrodo de trabajo y el platino como el electrodo (counter). Cabe recordar que para la formación del PSi se trabaja en el régimen galvanostático, es decir, que un electrodo es mantenido en un régimen de corriente constante.

El diseño y tamaño de la celda electroquímica, la geometría de los electrodos (platino y silicio), así como los parámetros experimentales utilizados, determinan las propiedades morfológicas del PSi. La tabla 2.3 resume los efectos de los parámetros de fabricación en la formación del PSi.

Dirección General de Bibliotecas de la UNIQ

Hipótesis y objetivos

3.1. Hipótesis

Es posible fabricar mediante estructuras multicapa de índice de refracción variable basadas en PSi una microcavidad tipo Fabry-Pérot cuya longitud de onda de resonancia se encuentre en el espectro visible, con un factor de calidad alto, para su posible aplicación a dispositivos láser.

3.2. Objetivo general

- Diseñar y fabricar una microcavidad tipo Fabry-Pérot con longitud de onda resonante en el espectro visible basada en silicio poroso mediante anodización electroquímica y monitoreada con fotoacústica para su posible aplicación a dispositivos láser.

3.3. Objetivos particulares

- Fabricar monocapas de PSi a diferentes densidades de corriente mediante anodización electroquímica y monitoreadas con fotoacústica para la obtención de curvas de calibración.
- Diseñar y fabricar dispositivos DBR basados en PSi utilizando los parámetros obtenidos en las curvas de calibración para el estudio sus propiedades ópticas y morfológicas.
- Estudiar el efecto de la rugosidad en estructuras multicapa de PSi mediante la simulación y ajustado del espectro de los DBR con algoritmos genéticos.
- Simular la respuesta óptica de las microcavidades ópticas mediante el método de la matriz de transferencia para comparar con las respuestas ópticas reales de las microcavidades.
- Diseñar y fabricar microcavidades Fabry-Pérot basados en PSi utilizando los parámetros obtenidos en las curvas de calibración para el estudio sus propiedades ópticas y morfológicas.
- Calcular el factor de calidad de la microcavidad usando su respuesta óptica para compararla con las reportadas en la bibliografía.

Metodología

4.1. Materiales

Para la fabricación de las MFP se utilizaron como sustratos obleas de silicio monocristalino (c-Si) altamente dopado con boro (p^{++}) de la compañía Pure Wafer. Las obleas tenían una resistividad de $0.001 \Omega \text{ cm}$, una orientación cristalina (100) y estaban pulidas solo de un lado. Para la obtención de las muestras, las obleas se cortaron en cuadrados de 1 cm^2 .

Como proceso de limpieza de las muestras se utilizó el método RCA [88], se utilizó agua desionizada, hidróxido de amonio (NH_4OH 29 % en peso) y peróxido de hidrógeno (H_2O_2) suministrados por la compañía Sigma-Aldrich.

Para la preparación del electrolito se utilizó ácido fluorhídrico (HF %48 en peso) y etanol ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ % en peso) de la compañía Sigma-Aldrich.

4.2. Monitoreo *in-situ* mediante fotoacústica

Cuando un haz modulado de luz incide sobre la superficie de un material en una celda cerrada, ondas sonoras son producidas y pueden ser detectadas. A este efecto se le conoce como efecto fotoacústico, se produce cuando los fotones absorbidos por el material son transformados en energía cinética de las moléculas del gas en la celda cerrada y fue explicado teóricamente para sólidos por Rosenzweig y Gershoallows en 1976 [89]. Con base en este efecto, se desarrolló la técnica fotoacústica (FA), la cual consiste en el estudio de la señal PA, que depende de la intensidad de la radiación incidente y de las propiedades del material absorbente. Esta técnica ha sido utilizada para la determinación de propiedades físicas de los materiales [90, 91] e incluso en medicina para el escaneo y monitoreo no invasivo de enfermedades [92, 93].

Esta técnica también se ha implementado para el monitoreo en tiempo real de la formación de silicio poroso [94, 95]. En los trabajos anteriores se demostró que la señal fotoacústica producida en la formación de una capa de P_{Si} es periódica en el tiempo. Esto es debido a que los cambios producidos en el camino óptico, propios de la formación de la capa porosa, modifican la intensidad de la radiación transmitida (del láser) la cual a su vez modula la señal FA. Esta modulación también es periódica y depende de la fase a incidencia normal dada por

$$\delta(t, p) = \frac{2\pi\eta_{\text{PSi}}(p)d(t)}{\lambda}, \quad (4.1)$$

donde p es la porosidad, $\eta_{\text{PSi}}(p)$ es el índice de refracción de la capa de PSi y es dependiente de la porosidad, $d(t)$ es el espesor de la capa y λ es la longitud de onda del láser. Cada ciclo de la señal se denomina ciclo FA. Sus mínimos y máximos de interferencia se dan en función de las condiciones de reflectancia y anti-reflectancia.

Un mínimo en la señal fotoacústica ocurre cuando la reflectancia de la capa de PSi es máxima, y está dado por

$$\delta(p, t) = \left(m - \frac{1}{2}\right) \pi, \quad \text{condición de anti-reflectancia.} \quad (4.2)$$

Un máximo ocurre cuando la reflectancia es mínima, dado por

$$\delta(p, t) = m\pi, \quad \text{condición de reflectancia,} \quad (4.3)$$

para $m = 1, 2, 3, \dots$ que se relacionan con el número de ciclos FA. Por lo tanto, esta técnica también permite la determinación del índice de refracción de la capa de PSi, para la longitud de onda del láser, a partir del espesor y la señal FA. (Esto último sólo si la señal fotoacústica termina en un máximo o un mínimo.)

4.3. Arreglo experimental para la fabricación de PSi

La figura 4.1 muestra el arreglo experimental para la fabricación de PSi mediante anodización electroquímica. Este arreglo consiste en una celda electroquímica acoplada a una celda fotoacústica con una celda externa usada como referencia y un sistema de adquisición de datos. Con el sistema de celda externa es posible comparar la señal FA de la muestra anodizada con una muestra de control, lo cual permite reducir ruidos externos y mejorar la señal FA de la muestra.

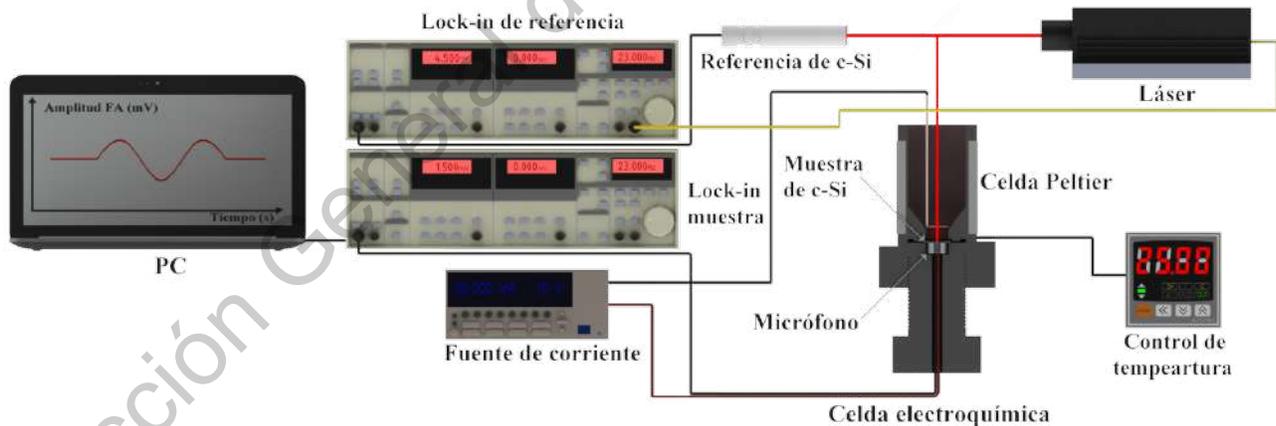


Figura 4.1: Arreglo experimental para la fabricación de PSi monitoreado con fotoacústica. Tomado y adaptado de [2].

La celda electroquímica con control de temperatura consta de un recipiente resistente a HF para contener el electrolito. Mediante un tornillo, el micrófono y la muestra de c-Si con colocados dentro lo la celda, quedando de esta manera sellada. Se utilizó un electrodo de Pt como cátodo en

forma circular cuya área de ataque de 0.785 cm^2 y un electrodo de Cu como ánodo. Los perfiles de corriente fueron suministrados mediante una fuente de corriente Keithley (6220). Un láser (Laser-Mate Group con $< 200 \text{ mV}$ de potencia) de $\lambda_0 = 808 \text{ nm}$ de longitud de onda fue empleado para el monitoreo mediante FA. El haz láser se dividió usando un divisor de haz 60/40, el haz transmitido y el reflejado se enfocaron en la muestra de c-Si de referencia de la celda externa y en la muestra de c-Si de la celda electroquímica respectivamente. Los micrófonos se localizaron en la parte trasera de las muestras de c-Si y se polarizaron usando una batería de 9 V DC . La amplitud de la señal FA fue obtenida mediante dos Lock-In Stanford Research SR830, una para la muestra externa y otro para la muestra anodizada, y una tarjeta de adquisición de datos GPIB-USB-HS (National Instruments) acoplados a una computadora. A la celda electroquímica se le adaptaron dos celdas Peltier para el control de temperatura del electrolito. Estas a su vez estaban controlados por termopares y un controlador PID (AUTONICS TC4S).

Las muestras de PSi fueron fabricadas mediante anodización electroquímica con un electrolito compuesto por HF y etanol en una relación 3:7 V/V. La modulación del láser se estableció en 23 Hz y la temperatura del electrolito de mantuvo a $25 \text{ }^\circ\text{C}$.

La celda electroquímica fue calibrada mediante dos series de calibración (S1 y S2), las cuales consistieron en la fabricación de 9 muestras anodizadas a $5, 10, 15, 20, 25, 30, 40, 50, 60 \text{ mA/cm}^2$ cada una, con el fin de relacionar la velocidad de formación, la porosidad y el tiempo de un ciclo FA con la densidad de corriente de anodización (J). Con los parámetros obtenidos en las series de calibración se diseñaron cinco CF, tres DBR y dos MFP. Un total de 23 muestras de c-Si fueron utilizadas en estos experimentos.

4.4. Caracterización de las muestras

4.4.1. Microscopía electrónica de barrido

La microscopía electrónica de barrido (SEM) permite el estudio morfológico de las películas de PSi así como la determinación de los espesores de éstas. Se tomaron imágenes de sección transversal de las muestras con un equipo Hitachi SU8230 de emisión de campo empleando electrones secundarios con un voltaje de aceleración de 1 kV y una distancia de trabajo entre 3 y 5 mm .

4.4.2. Espectroscopía UV-Vis

Se obtuvieron las medidas de reflectancia especular UV-Vis de las muestras de las series de calibración y de los CF. Estas medidas fueron realizadas en un espectrofotómetro PerkinElmer Lambda 35 a 6° en un rango de 210 a 1100 nm . El espectrofotómetro fue calibrado usando un espejo de aluminio y las muestras fueron medidas sobre un sustrato de c-Si, por lo que la reflectancia medida es la respuesta óptica del PSi sobre la del Si (PSi/Si). Para obtener la reflectancia absoluta, ésta fue normalizada mediante la función de transferencia del espectrofotómetro dada por las siguientes ecuaciones

$$R(\lambda) = R_{rel}(\lambda)R_{trans}(\lambda), \quad (4.4)$$

$$R_{trans}(\lambda) = \frac{R_{Teo}^{(Si)}(\lambda)}{R_{rela}^{(Si)}(\lambda)}, \quad (4.5)$$

donde R es la reflectancia absoluta de la muestra, R_{trans} es la función de transferencia del espectrofotómetro la cual depende de la reflectancia relativa medida de una muestra de c-Si ($R_{rela}^{(Si)}$) y de la reflectancia teórica del c-Si ($R_{Teo}^{(Si)}$).

Dirección General de Bibliotecas de la UAQ

Resultados y discusión

5.1. Fabricación de monocapas a base de silicio poroso

5.1.1. Serie de calibración

Para el diseño y fabricación de CF basados en PSi, se realizaron dos series de calibración (S1 y S2) para calibrar la celda electroquímica y obtener curvas de calibración para relacionar el tiempo de un ciclo FA, la velocidad de crecimiento y la porosidad del PSi con la corriente de anodización aplicada. Estas series son iguales y constan de 9 monocapas de PSi anodizadas a 5, 10, 15, 20, 25, 30, 40, 50 y 60 mA/cm². Todas las monocapas fueron monitoreadas con FA y anodizadas durante 4 ciclos FA (ver Apéndice A). La figura 5.1b muestra la señal FA típica obtenida en la fabricación de PSi. Se puede observar que la señal es periódica en el tiempo y de la ecuación (4.1) cabe notar que el incremento en la densidad de corriente aumenta la velocidad de crecimiento y la porosidad, lo que produce una reducción en los ciclos FA, es decir, a mayor densidad de corriente más corto es el ciclo FA obtenido.

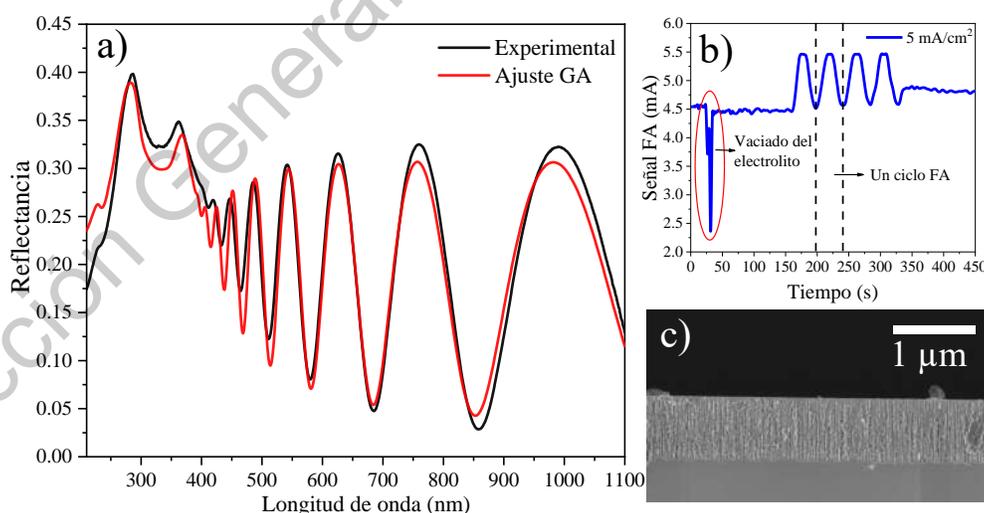


Figura 5.1: a) Espectro de UV-Vis ajustado con GA, b) señal FA y c) imagen trasversal de SEM de una muestra de PSi fabricada a 5 mA/cm².

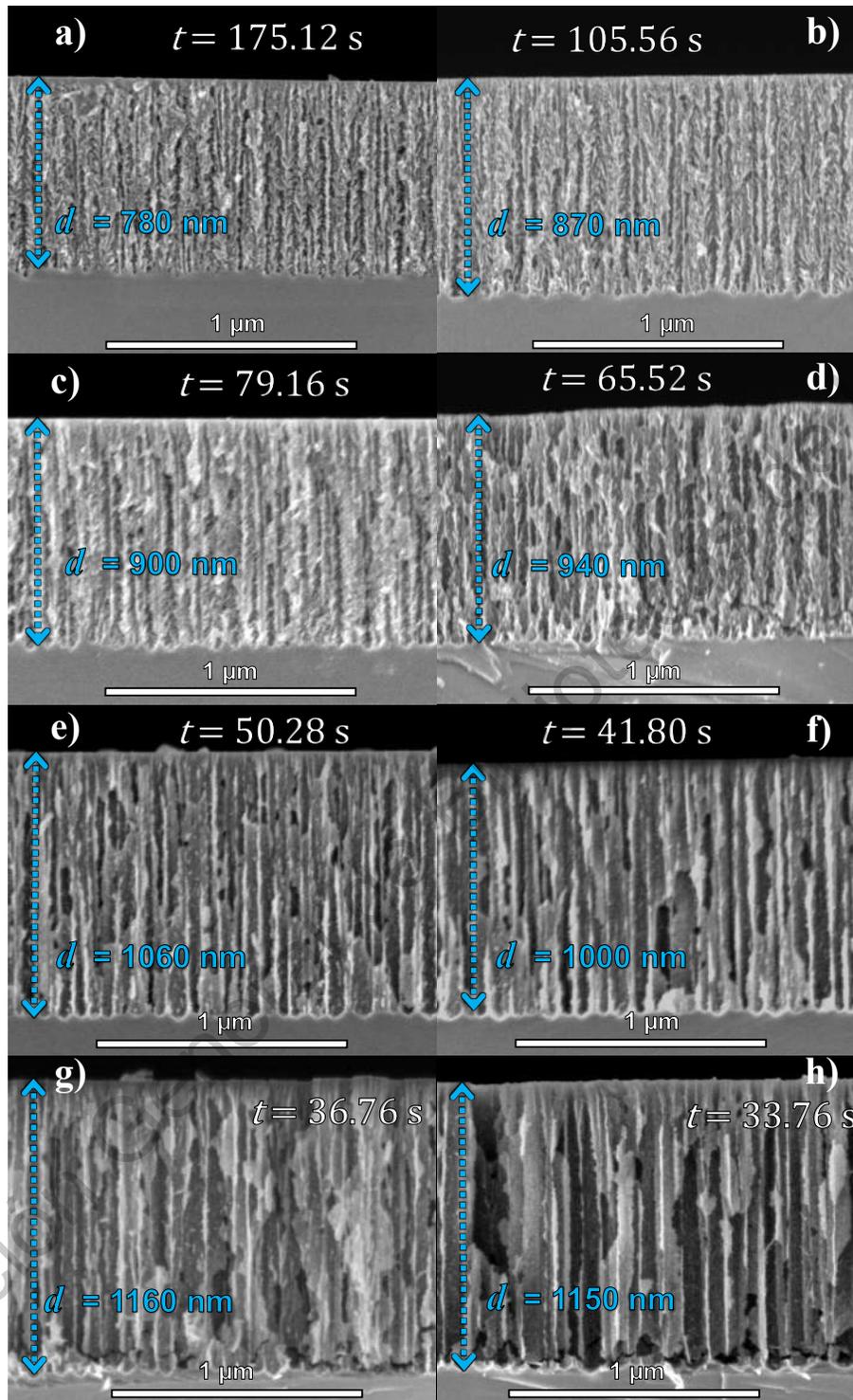


Figura 5.2: Imágenes de SEM de sección transversal de las series de calibración. a) 5 mA/cm², b) 10 mA/cm², c) 15 mA/cm², d) 20 mA/cm², e) 30 mA/cm², f) 40 mA/cm², g) 50 mA/cm² y h) 60 mA/cm². En cada imagen se muestra el tiempo total de anodización. Tomado y adaptado de [2].

Una vez que se fabricaron las dos series de calibración, se realizaron las medidas de UV-Vis de ambas series para obtener la respuesta óptica de cada muestra (ver Apéndice B). Posteriormente, cada espectro fue ajustado usando GA siguiendo la metodología descrita por Ramirez-Gutierrez [70], para obtener la porosidad, el espesor y la rugosidad interfacial usando TMM [72] y la regla de medio efectivo de LLL. La figura 5.1a muestra el espectro UV-Vis de una muestra de PSi fabricada a 5 mA/cm^2 y el ajuste mediante GA. Para la descripción morfológica, las muestras fueron caracterizadas mediante SEM para obtener el espesor de las capas. La figura 5.2 muestra las imágenes de sección transversal de las monocapas de PSi fabricadas en la serie de calibración, así como el tiempo total de anodización de cada una. Se puede observar que la porosidad y la velocidad de crecimiento aumenta en función de la densidad de corriente aplicada, ya que es evidente que el tamaño de poro aumenta. Además, todas las muestras exhiben una formación de poros rectos regular y rugosidad interfacial en la interface PSi/c-Si.

Con los datos obtenidos de las medidas de fotoacústica, ajuste con algoritmos genéticos e imágenes de SEM, se obtuvieron curvas de calibración para la fabricación de CF basados en PSi. La figura 5.3a muestra el tiempo de un ciclo FA como función de la densidad de corriente. Se observa un comportamiento exponencial decreciente válido para valores de densidad de corriente menores al régimen de electropulido. La figura 5.3b muestra la porosidad como función de la densidad de corriente. La porosidad es determinada usualmente mediante gravimetría [96], pero en este trabajo se utilizaron dos métodos diferentes para determinarla. El primer método consistió en obtenerla a través del ajuste con (GA) de los espectros de espectroscopía UV-Vis y el segundo método fue utilizando la condición de anti-reflectancia (ecuación (4.2)) de la señal FA junto con los espesores medidos en las imágenes de SEM, ya que se puede conocer el índice de refracción para $\lambda_0 = 808 \text{ nm}$ del PSi a partir de la ecuación (4.1), y posteriormente introducirlo en la regla de medio efectivo de LLL para obtener la porosidad. De este modo, se utilizaron 1.157 y 1.365 como índices de refracción del HF y del etanol respectivamente [97].

En ambos casos la porosidad como función de la densidad de corriente presenta un comportamiento logarítmico. Sin embargo, se pueden observar discrepancias entre los dos ajustes, esto es producido ya que la porosidad obtenida mediante métodos ópticos es dependiente del modelo empleado [98], por lo que se esperan desviaciones entre ambos métodos.

La figura 5.3c muestra la velocidad de crecimiento en función de la densidad de corriente. Se obtuvo, de igual manera, a través de dos métodos: con los espesores de los ajustes con GA y con los medidos en las imágenes de SEM, estos espesores se dividieron entre el tiempo total de anodización (ver figura 5.2) de las señales fotoacústicas correspondientes. Como se puede ver, los valores obtenidos con ambos métodos son cercanos y presentan un comportamiento lineal en el rango de 5 a 60 mA/cm^2 . En las figuras 5.3d,e se muestran las rugosidades de las interfaces (rugosidad media cuadrática) Aire/PSi (σ_{01}) y PSi/c-Si (σ_{12}) obtenidas en el ajuste genético. Este parámetro es dependiente de la composición del electrolito así como de la temperatura. Valores por debajo de 20 nm fueron encontrados.

5.2. Diseño y fabricación de reflectores de Bragg

Una vez obtenidas las curvas de calibración (figura 5.3) se prosiguió a diseñar y fabricar CF en una dimensión basados en PSi. Para el diseño de los DBR fue usadas las ecuaciones (2.52) y (2.53) para determinar la longitud de onda de centrado (λ_0) y el ancho de banda del PBG.

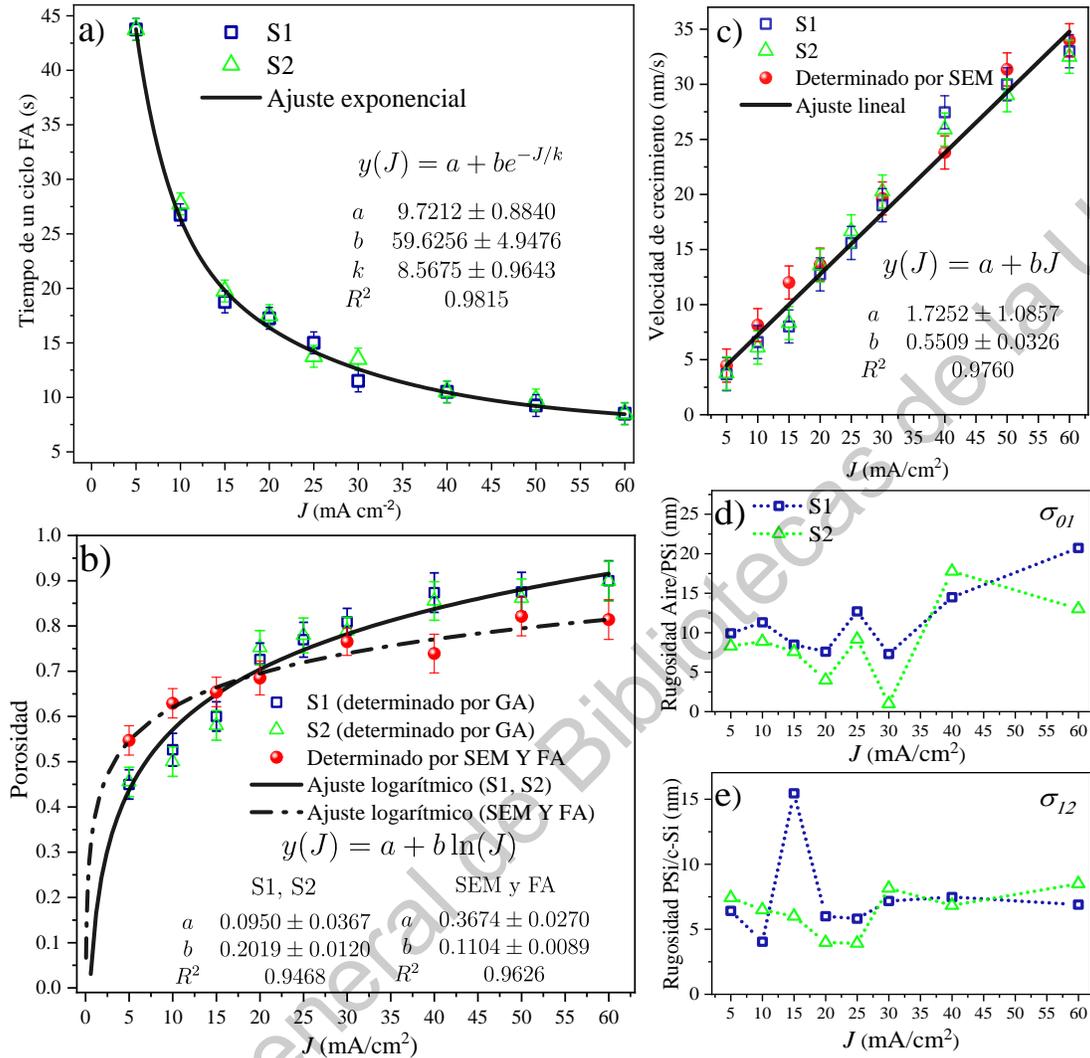


Figura 5.3: Curvas de calibración. **a)** Tiempo de un ciclo FA el cual muestra un decaimiento exponencial. **b)** Porosidad obtenida mediante ajustes con GA y con medidas de SEM Y FA. **c)** Velocidad de crecimiento la cual presenta un comportamiento lineal. **d)** y **e)** Rugosidad interfacial determinada con ajuste GA. Todos los parámetros se muestran en función de la densidad de corriente. Tomado y adaptado de [2].

Hay que tener en cuenta que los dos índices de refracción deben ser viables para la fabricación ya que la formación de poros en el c-Si reduce su índice de refracción, lo que implica que los índices de refracción para el diseño de los DBR deben estar entre el índice de refracción del c-Si (η_S) y del material que llena los poros (η_0), por ejemplo para $\lambda_0 = 800$ nm, se tendría que $\eta_S = 3.675$ y $\eta_0 \approx 1$. Cabe mencionar que los CF fueron fabricados en la región espectral entre 500 nm y 1450 nm en donde el índice de refracción y el coeficiente de extinción del silicio son aproximadamente

constantes. Para longitudes de onda menores a 500 nm éstos crecen rápidamente [99], por lo que es recomendable el diseño de CF en esta región espectral.

Los índices de refracción propuestos se transforman valores de porosidad usando la regla de medio efectivo de LLL (ecuación (2.45)). A través de la porosidad se define la corriente de anodización para cada capa del DBR (figura 5.3b) y con la corriente de anodización se establece el tiempo de anodización para obtener el espesor requerido (figura 5.3c) con las curvas de calibración obtenidas en la sección anterior.

Se diseñaron tres prototipos de DBR: el DBR550 que se diseñó cerca la región UV antes de que termine la región aproximadamente constante del índice de refracción y el coeficiente de extinción del c-Si, esta estructura no contiene la longitud de onda del láser de FA. El DBR700 fue diseñada con un alto contraste de índices de refracción, esto significa un alto contraste de porosidad entre capas, lo que produce un PBG ancho. Además, la longitud de onda del láser de FA está cerca del PBG para mostrar el efecto de la formación de éste sobre la señal FA. El DBR750 es una estructura diseñada con un contraste de índices de refracción bajo, lo que significa un contraste bajo de porosidad de capas para producir un PBG estrecho. Todos los DBR están formados por 15 períodos.

Es bien sabido que la señal FA depende de la porosidad, velocidad de formación y la longitud de onda de del láser FA, además de que para tiempos de anodización cortos la velocidad de crecimiento es aproximadamente constante [2]. De este modo, cada componente en frecuencia de la señal FA está relacionada con la formación de cada capa de forma individual. Por lo tanto, para tener un buen control en el proceso de fabricación, se seleccionaron espesores cuyos tiempos de anodización fueran la mitad de un ciclo fotoacústico (figura 5.3a), es decir, que terminarían en un mínimo o en un máximo de reflectancia, esto para obtener ciclos FA simétricos. Los DBR550 y DBR700 fueron diseñados de esta manera. Si esta condición no se cumple, la señal FA mostrará la forma de un batido. El DBR750 fue diseñado con espesores cuyos tiempos de anodización no correspondían a la mitad del ciclo FA.

La tabla 5.1 muestra los parámetros utilizados para el diseño de los tres prototipos de DBR así como la secuencia de capas que se utilizó para cada uno. Los valores se usaron para simular la reflectancia de cada estructura con el TMM.

| Estructura | DBR550 | DBR700 | DBR750 |
|----------------------|--------------|--------------|--------------|
| Secuencia | $(HL)^{15}S$ | $(HL)^{15}S$ | $(HL)^{15}S$ |
| λ_0 (nm) | 550 | 700 | 750 |
| $\Delta\lambda$ (nm) | 78 | 164 | 66 |
| η_H | 1.45 | 1.73 | 2.26 |
| η_L | 1.16 | 1.20 | 1.97 |
| d_H (nm) | 95 | 102 | 83 |
| d_L (nm) | 131 | 146 | 96 |

Tabla 5.1: Parámetros de diseño para los DBRs.

La tabla 5.2 muestra los parámetros experimentales empleados para el proceso de fabricación, tales como los tiempos de anodización ($t_{H,L}$) y las corrientes de anodización ($J_{H,L}$) para cada capa de los tres prototipos de DBR. De igual modo se presentan los parámetros experimentales obtenidos

para la longitud de onda de centrado (λ_0), el ancho del PBG, las porosidades y espesores de cada capa, así como la rugosidad interfacial entre las capas H/L y L/H determinada mediante SEM.

| Estructura | DBR550 | DBR700 | DBR750 |
|--|--------------|--------------|--------------|
| Secuencia | $(HL)^{15}S$ | $(HL)^{15}S$ | $(HL)^{15}S$ |
| Parámetros de anodización | | | |
| $t_H \pm 0.05$ (s) | 6.03 | 16.87 | 13.20 |
| $t_L \pm 0.05$ (s) | 4.40 | 4.25 | 8.20 |
| J_H (mA/cm ²) ± 0.01 | 25 | 7.21 | 10 |
| J_L (mA/cm ²) ± 0.01 | 60 | 58.48 | 20 |
| Parámetros obtenidos | | | |
| λ_0 (nm) | 572 | 725 | 764 |
| $\Delta\lambda$ (nm) | 64 | 140 | 67 |
| p_H | 0.75 | 0.68 | 0.57 |
| p_L | 0.92 | 0.91 | 0.70 |
| d_H (nm) | 90 \pm 5 | 107 \pm 8 | 110 \pm 8 |
| d_L (nm) | 140 \pm 9 | 143 \pm 7 | 122 \pm 8 |
| σ_{HL} | 15 | 20 | 12 |

Tabla 5.2: Parámetros experimentales de anodización usados en la fabricación y parámetros experimentales obtenidos para los DBR a basados en PSi. Los espesores se midieron mediante SEM. Las porosidades y rugosidad fueron obtenidas mediante ajustes con GA. El ancho del PBG y la longitud de centrado fueron determinadas con los espectros de reflectancia.

La figura 5.4 muestra la señal FA *in-situ* de cada DBR así como imágenes de sección transversal a diferentes magnificaciones y el perfil de corriente utilizado para cada DBR (figura 5.4g). Se puede observar que para el DBR550 (figura 5.4a) y el DBR700 (figura 5.4b) cada ciclo FA completo representa un par de capas HL dado que los tiempo de anodización (tabla 5.2) se establecieron como la mitad de un ciclo FA completo en cada caso, así, es posible la identificación en la señal FA de cada capa, como se puede observar en los acercamientos de la señal FA. El PBG del DBR550 se encuentra centrado en 550 nm, por lo que la longitud de onda del láser de FA no era reflejado por éste. Por lo tanto, la señal FA decrece a medida de que el DBR se forma y el camino óptico aumenta.

En el caso del DBR700 (figura 5.4c) se observa una rápida disminución de la señal FA conforme avanza el proceso de anodización, esto se debe a que la longitud de onda del láser de FA está muy cerca del PBG centrado en 700 nm, por lo que a medida de que más capas se fabrican, más luz proveniente del láser de FA es reflejada resultando en una disminución de la señal FA. Por otro lado, el DBR750 fue fabricado con tiempos que no correspondían a la mitad de un ciclo FA, por lo que se puede apreciar en la figura 5.4e la forma característica de un batido. Por esta razón, un ciclo de esta señal no corresponde a un par de capas HL , sin embargo, dado que se conocen las componentes de frecuencia para cada corriente de anodización, es posible el control del proceso de anodización.

En las figuras 5.4b y 5.4d, correspondientes a los DBR550 y DBR700 respectivamente, se puede apreciar cada capa que forma la estructura de manera individual, ya que el contraste entre porosidad es lo suficientemente grande, mientras que en el caso del DBR750 (figura 5.4f), dado el bajo contraste

entre las porosidades, las capas no son fácilmente identificables, sin embargo se puede apreciar todo el conjunto de éstas. En todos los DBR fabricados se aprecia rugosidad interfacial, siendo el DBR700 el que presenta una rugosidad mayor (tabla 5.2).

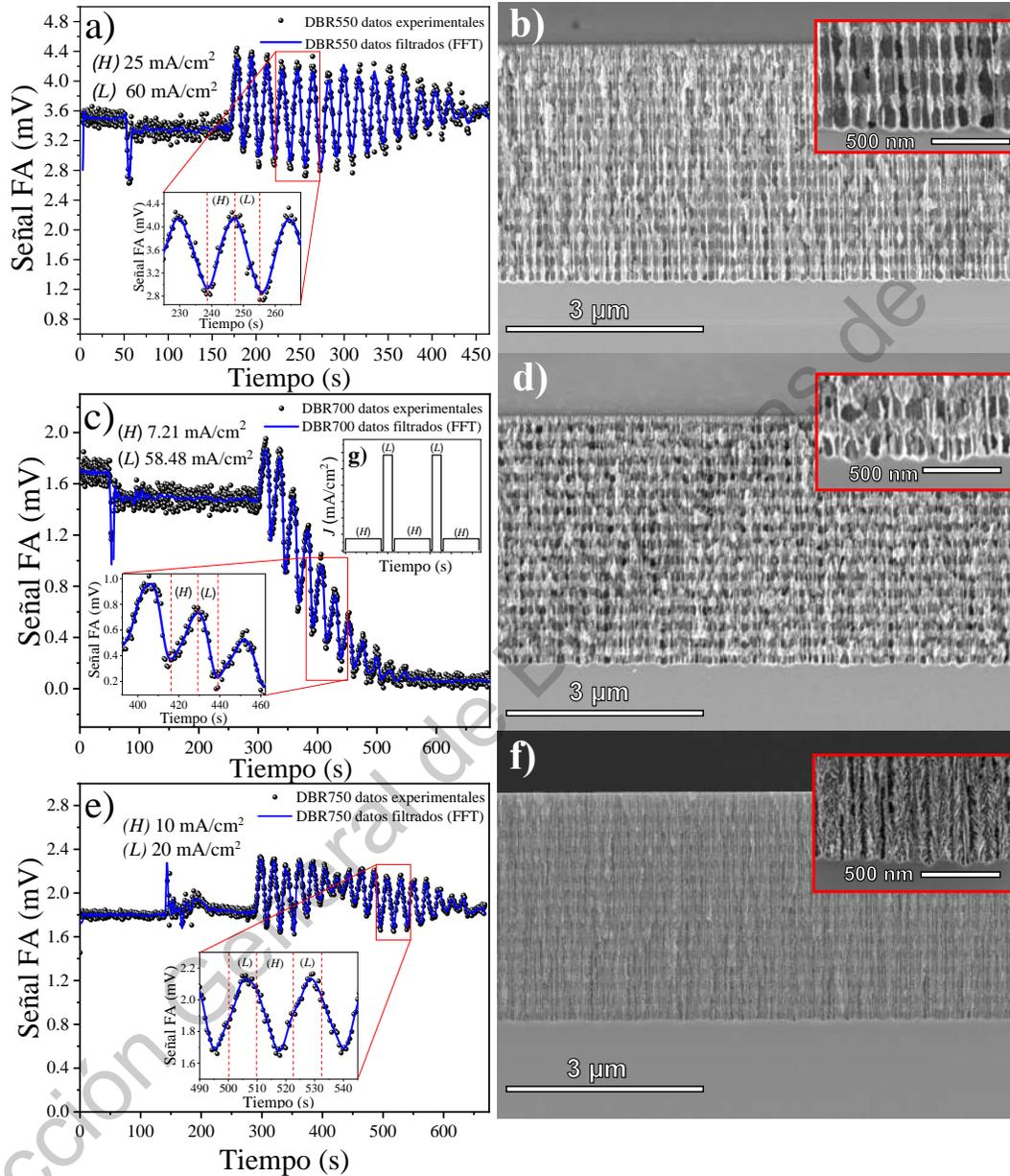


Figura 5.4: Señal FA producida durante la formación de los DBR: a) DBR550, c) DBR700 y d) DBR750. Las figuras b), d) y f) muestran imágenes de sección transversal tomadas con SEM para cada DBR respectivamente. Cada figura de FA muestra un acercamiento donde se define la formación de cada capa. g) Representa el perfil de corriente utilizado para la fabricación de los DBR. Tomado y adaptado de [2].

En la figura 5.5 muestra los espectros de reflectancia medidos y simulados para cada uno de los DBR y junto con los valores medidos experimentalmente (tabla 5.2) se puede observar que hubo un corrimiento al rojo de aproximadamente 20 nm en la longitud de onda de centrado. También se observa que los espesores promedio de las capas es mayor al de los diseños. Estas desviaciones se deben principalmente a capacitancias parásitas en la estructura multicapa y el circuito electroquímico [100, 101]. Estas capacitancias producen un proceso de descarga una vez se apaga la fuente de corriente, lo que genera que la reacción electroquímica siga activa por un periodo corto de tiempo y se obtengan espesores mayores a los previamente diseñados. Estas desviaciones en los espesores fueron de aproximadamente 15 nm (ver tablas 5.1 y 5.2), por lo que se produjo un corrimiento al rojo proporcional al camino óptico. En la figura 5.6 se presenta una foto de los DBR.

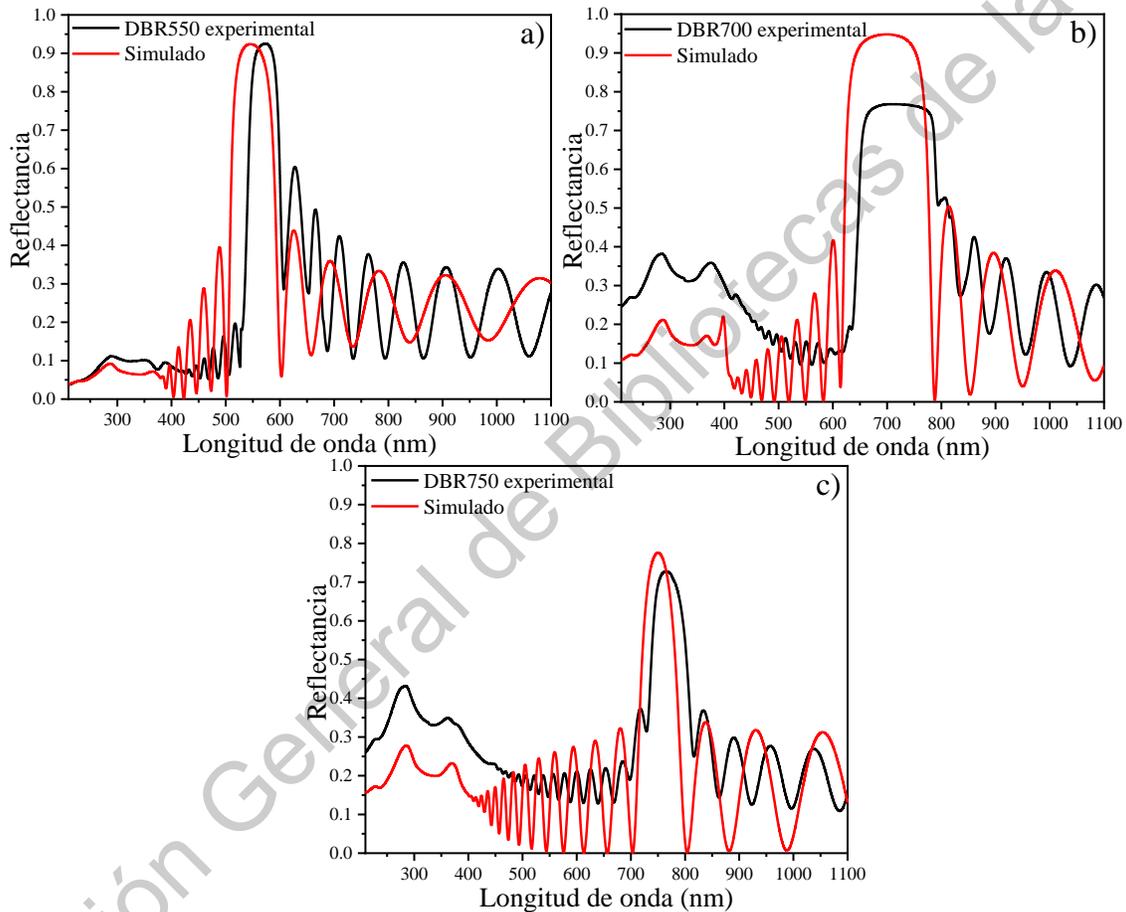


Figura 5.5: Espectros de reflectancia experimentales (negro) y simulados (rojo) para: a) DBR550, b) DBR700 y c) DBR750. Tomado y adaptado de [2].

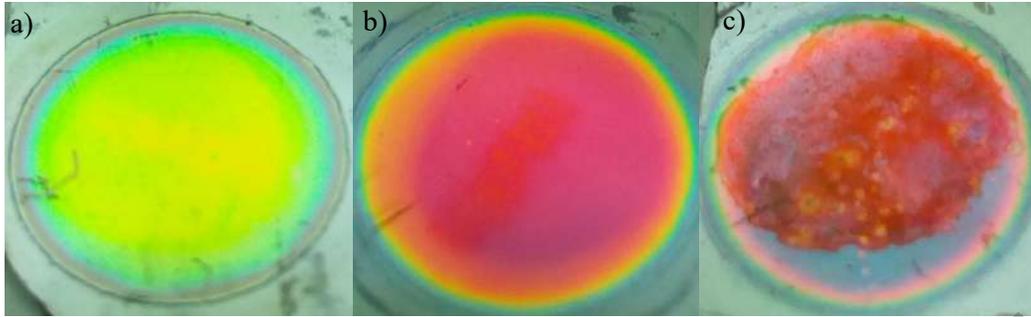


Figura 5.6: Fotos de las muestras de: a) DBR550, b) DBR700 y c) DBR750.

5.3. Efectos de la rugosidad en reflectores de Bragg basados en silicio poroso

Como se puede observar en las figuras 5.4b, 5.4d y 5.4f las estructuras de PSi presentan defectos de fabricación intrínsecos los cuales modifican la respuesta óptica. Estos efectos se pueden ver en la figura 5.5 donde las intensidades de los PBG experimentales, difieren de los simulados. La rugosidad interfacial está presente en las técnicas de fabricación de CF más comunes, como lo son anodización electroquímica y litografía para el caso de cristales fotónicos fabricados con semiconductores [102, 103]. Incluso en técnicas de alta precisión como la litografía por haz de electrones, no se logran interfaces totalmente suaves [104, 105]. Por lo tanto, la rugosidad es un parámetro que siempre está presente y es inherente al método de fabricación, es por esto que es importante conocer el comportamiento de cristales fotónicos en función de éste.

Hay varios trabajos que involucran CF basados en PSi los cuales han considerado rugosidad interfacial [106], sin embargo estos trabajos no muestran el comportamiento de la respuesta óptica en función de la rugosidad. Maxwell et al. [107, 108] reportó una metodología para estudiar el efecto de la rugosidad en el PBG de CF de una dimensión, sin embargo, en dicho trabajo utilizaron índices de refracción constantes y materiales no absorbentes. Es por esto que en esta sección se estudiará el efecto principal que tiene la rugosidad interfacial en la posición espectral y la forma del PBG, así como la reducción en la calidad óptica de un CF basado en PSi.

5.3.1. Rugosidad

La introducción de la rugosidad en el formalismo del TMM se hace mediante un tratamiento estadístico considerando los efectos en la propagación de las ondas electromagnéticas debido a su interacción con una superficie aleatoriamente rugosa [109, 110, 111]. La rugosidad (σ) se describe en función de la raíz media cuadrática (rms) de la distribución de tamaños de las irregularidades, tomando en cuenta que σ debe ser menor que la longitud de onda incidente, y los tamaños de las irregularidades tienen una distribución gaussiana.

El efecto de una interface rugosa es un cambio de fase en las ondas reflejadas y transmitidas (ver figura 5.7), lo que tendrá como consecuencia un efecto de interferencia destructiva que disminuirá la intensidad de las ondas. Para la onda reflejada, este cambio de fase debido a una irregularidad de

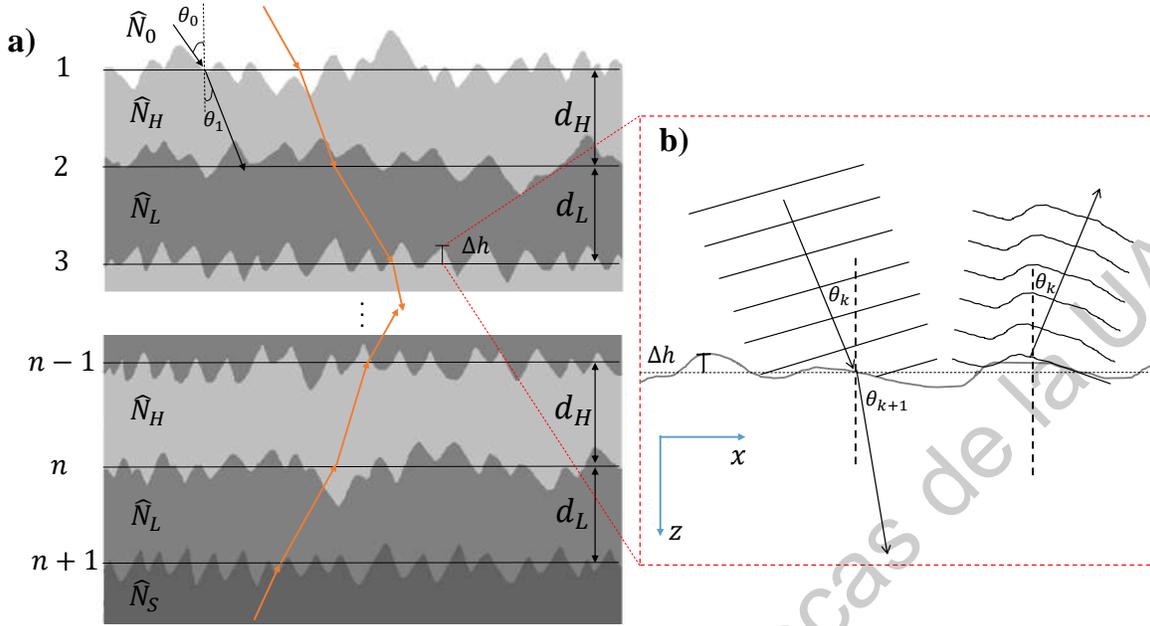


Figura 5.7: **a)** Representación de la rugosidad interfacial presente en un CF basado en PSi. **b)** Deformación del frente de onda y cambio de fase en las ondas reflejada y transmitida debido a la interacción con la interface rugosa. Tomado y adaptado de [3].

altura Δh , como se muestra en la figura 5.7b, está dado por

$$\phi_r = \frac{4\pi}{\lambda} \eta \Delta h \cos \theta. \quad (5.1)$$

Tomando en cuenta la rms de la rugosidad para un cambio de fase promedio a través de la interface, el coeficiente de reflexión de Fresnel se convierte a

$$r = r^{(0)} \exp\left(-\frac{1}{2} \phi_r^2\right), \quad (5.2)$$

donde el superíndice (0) hace referencia a los coeficientes comunes de Fresnel para una superficie suave.

La diferencia de fase en el caso de la onda transmitida de un medio con índice de refracción η_1 a otro con índice de refracción η_2 debido a la misma irregularidad está dado por

$$\phi_t = \frac{2\pi}{\lambda} \Delta h (\eta_2 \cos \theta_2 - \eta_1 \cos \theta_1), \quad (5.3)$$

y el coeficiente de transmisión de Fresnel toma la siguiente forma

$$t = t^{(0)} \exp\left(-\frac{1}{2} \phi_t^2\right). \quad (5.4)$$

Los coeficientes modificados de Fresnel para interfaces rugosas usados en el TMM (ecuación 2.48) son

$$r_{k-1,k} = r_{k-1,k}^{(0)} \exp(-2(2\pi\eta_{k-1}\sigma_k/\lambda)^2) = \zeta r_{k-1,k}^{(0)}, \quad (5.5)$$

$$r_{k,k-1} = r_{k,k-1}^{(0)} \exp(-2(2\pi\eta_k\sigma_k/\lambda)^2) = \varkappa r_{k,k-1}^{(0)}, \quad (5.6)$$

$$t_{k-1,k} = t_{k-1,k}^{(0)} \exp(-1/2(2\pi\sigma_k/\lambda)^2(\eta_k - \eta_{k-1})^2) = \xi t_{k-1,k}^{(0)}, \quad (5.7)$$

$$t_{k,k-1} = t_{k,k-1}^{(0)} \exp(-1/2(2\pi\sigma_k/\lambda)^2(\eta_{k-1} - \eta_k)^2) = \xi t_{k,k-1}^{(0)}. \quad (5.8)$$

5.3.2. Diseño de estructuras

Para el estudio de los efectos de la rugosidad interfacial en la respuesta óptica de CF de una dimensión basados en PSi se simularán cuatro casos. El primer caso será una monocapa de 450 nm de espesor y una porosidad de 0.66 sobre un sustrato de c-Si la cual presenta contribuciones de rugosidad en la interface PSi/c-Si. En los tres casos restantes se estudiará la respuesta óptica del DBR700 (ver figuras 5.4d y 5.5b) con contribuciones de rugosidad en distintas interfaces. DBR1 presenta rugosidad en la primera interface (Aire/DBR), entre el aire y la primera capa del DBR. DBR2 presenta rugosidad en todas las interfaces del DBR, es decir, en la interfaces H/L y L/H . Por último, el DBR3 presenta contribuciones de rugosidad en la última interface (DBR/c-Si), entre el DBR y el sustrato de c-Si. Cada caso fue simulado en el espectro de 210-1100 nm.

5.3.3. Resultados numéricos

La figura 5.8 muestra la respuesta óptica de la monocapa y de los tres DBR como función de la rugosidad (rms). En el caso de la monocapa (ver figura 5.8a) se simuló hasta una rugosidad de 200 nm para tener un tamaño comparable con el espesor de la monocapa. Se puede observar que el mayor efecto de la rugosidad es la pérdida en la intensidad de las franjas de interferencia, mientras que la región del UV permanece casi constante, esto se debe a que el c-Si es altamente absorbente en la región del UV, lo que causa que la radiación sea absorbida antes de llegar a la interface rugosa. Este efecto se puede apreciar de mejor manera en la figura 5.9a, la cual muestra la relación de aspecto entre una monocapa ideal (rms = 0 nm) y una rugosa (rms = 200 nm) y se aprecia que en la región del UV es aproximadamente 1. La rugosidad máxima simulada en los DBR fue de 50 nm para que de igual manera fuera comparable con los espesores de las capas. En el caso del DBR1, con rugosidad en la interface Aire/DBR (figura 5.8b), se observa una disminución considerable en la región del UV ya que las longitudes de onda son comparables con la rugosidad, lo que hace que casi toda la radiación con dichas longitudes de onda sea dispersada (o absorbida debido a el coeficiente de extinción del c-Si en esa región) antes de llegar a las demás interfaces. Esto provoca que la reflectancia caiga casi a cero cuando la rugosidad es de aproximadamente 20 nm. Para las regiones visibles e infrarroja (IR), se pueden notar ligeros cambios en la respuesta óptica, ya que las longitudes de onda del PBG no se ven tan afectadas. Para rugosidades mayores a 20 nm el PGB presenta un estrechamiento y una disminución en la reflectancia total de aproximadamente 20%. La figura 5.9 muestra los efectos anteriormente mencionados. En el DBR2 (figura 5.8c), el cual todas sus interfaces H/L y L/H presentan rugosidad, se aprecian cambios significativos en el PBG, ya que éste se hace más estrecho y su reflectancia máxima disminuye, esto debido a que las longitudes de onda que cumplen con la condición de un cuarto de longitud de onda (ecuación (2.52)) son dispersadas en todas las interfaces que presentan rugosidad, generando pérdidas en las múltiples reflexiones y fenómenos de interferencia que producen el PBG. Esto tiene como resultado una disminución en la reflectancia

del PBG de aproximadamente 40% y un estrechamiento de 50 nm para valores de rugosidad rms de 50 nm. En la figura 5.9c se puede ver que la región del UV permanece casi constante, como en el caso de la monocapa, y que incluso las franjas de interferencia en el IR se ven afectadas. Por último, en el caso del DBR3 el cual solo presentaba rugosidad en la interface DBR/c-Si, el PBG no se ve afectado ya que todas las interfaces que generan los efectos de interferencia no presentan rugosidad. Este comportamiento se puede apreciar en las figuras 5.8d y 5.9d, sin embargo en esta última se puede notar que las franjas de interferencia cambian a ambos lados del PBG, lo que sugiere que estas longitudes de onda alcanzan a ser dispersadas al llegar a la interface rugosa.

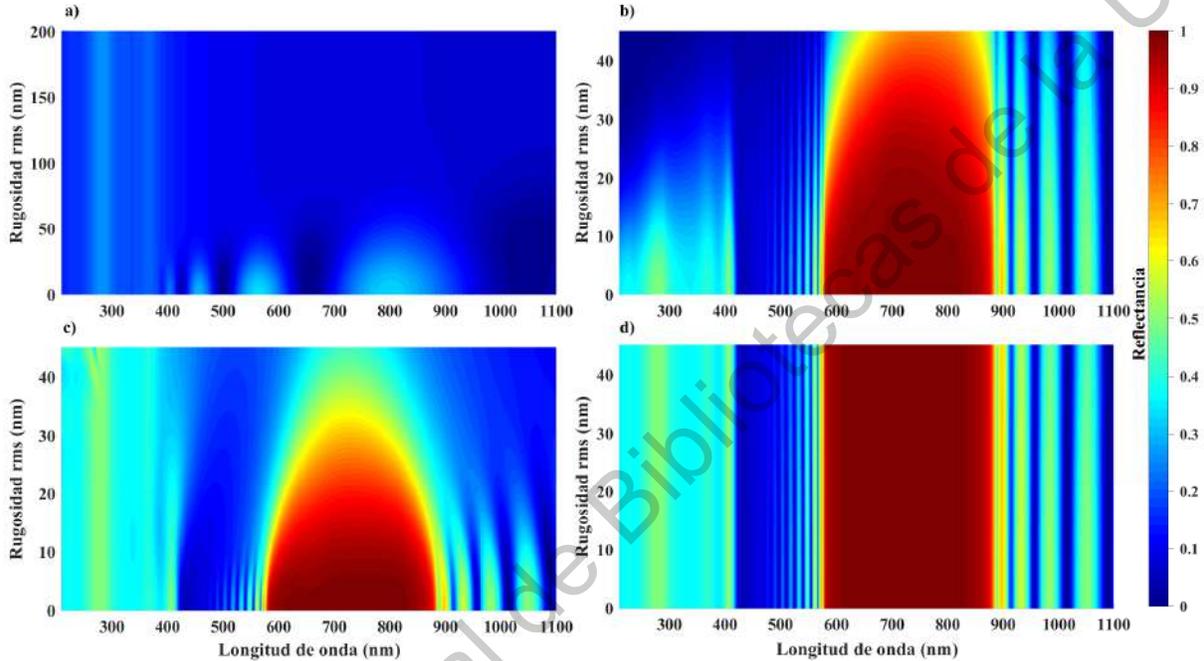


Figura 5.8: Efectos de la rugosidad en los diferentes casos analizados. **a)** Monocapa con contribuciones de rugosidad en la interface P*Si*/c-*Si*, **b)** DBR1 que presenta rugosidad en la interface Aire/DBR, **c)** DBR2 con contribuciones de rugosidad en todas las interfaces *HL* y **d)** DBR3 con rugosidad en la interface DBR/c-*Si*. Tomado y adaptado de [3].

Por lo tanto, con base en el anterior análisis se determinaron los principales efectos de la rugosidad interfacial en la respuesta óptica de CF en una dimensión basados en P*Si*. Se determinó que la rugosidad interfacial H/L y L/H tiene un impacto considerable en la intensidad de la reflectancia, forma y ancho del PBG, sin embargo, la longitud de onda de centrado permanece invariante. Por otro lado, como se muestra en la figura 5.5b, existen discrepancias entre el modelo simulado y el resultado experimental en cuestión de máximo de intensidad. El modelo implementado en el método de TMM solo considera interfaces rugosas y atenuación debido al índice de refracción complejo, sin embargo, los CF basados en P*Si* presentan otros tipos de pérdidas ópticas que no se consideraron, como esparcimiento espacial superficial y de bulto (debido a la morfología de los poroso) y absorción debida a confinamiento cuántico producido por las paredes de los poros en la capa de alta porosidad (*H*). Estos efectos tienen efecto solamente en la intensidad de la reflectancia.

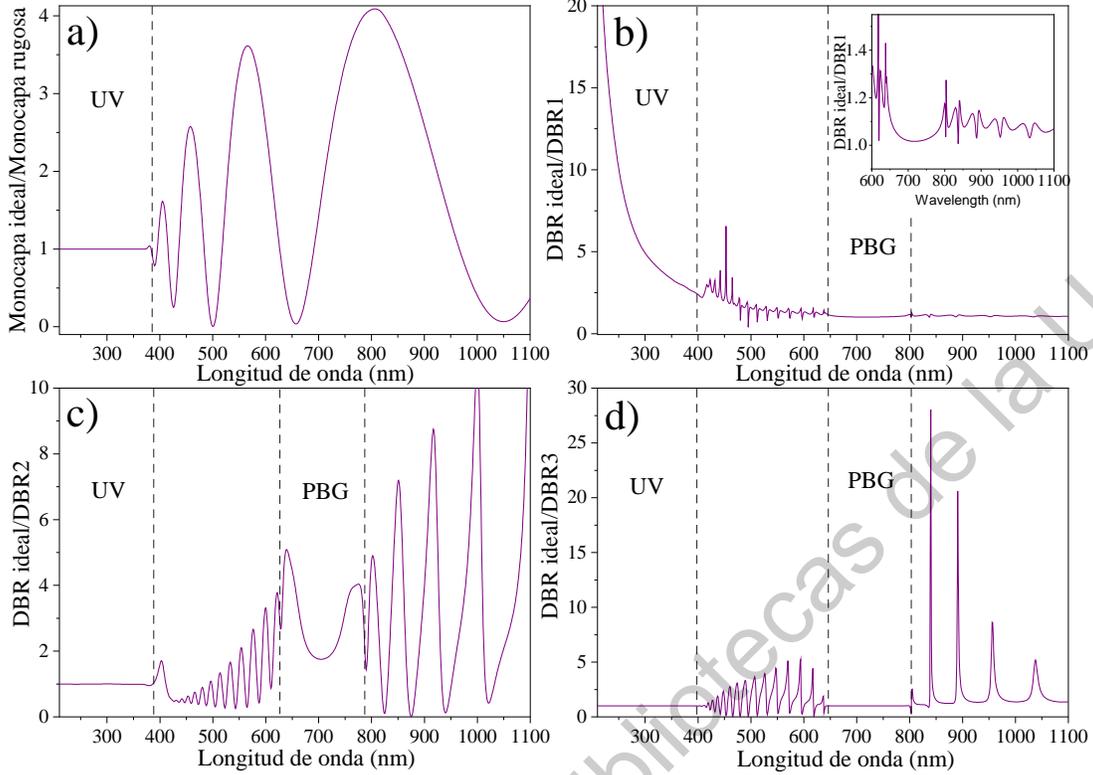


Figura 5.9: Contraste entre la reflectancia ideal y la reflectancia con contribuciones de rugosidad para: a) una monocapa, b) DBR1, c) DBR2 y d) DBR3 . Tomado y adaptado de [3].

La baja intensidad de reflectancia que presenta el DBR750 (figura 5.5c) se puede atribuir a la dispersión por bulto, al ser un estructura compacta y tomando en cuenta que el contraste entre porosidades es tan bajo, la rugosidad interfacial es menos relevante.

5.4. Diseño y fabricación de microcavidades tipo Fabry-Pérot basadas en silicio poroso

Una vez probada la metodología basada en FA con las series de calibración y conociendo los principales efectos de la rugosidad interfacial en DBR basados en P_{Si}, dos MFP fueron diseñadas y fabricadas MFP1 y MFP2, las cuales están basadas en los mismos parámetros utilizados para la fabricación del DBR700, esto quiere decir que una capa de defecto fue introducida en la estructura del DBR700 para crear un modo de defecto. La MFP1 fue diseñada para presentar dos modos de defecto en el PBG, mientras que la MFP2 fue diseñada para presentar solo un modo de defecto.

Los parámetros de diseño, así como la secuencia de ambas MFP se encuentran resumidos en la tabla 5.3. La MFP1 fue diseñada con una secuencia $(HL)^3L_{c_1}(HL)^3S$ de donde la capa de defecto (H_{c_1}) tiene un espesor de $d_{H_c} = 330$ nm, para formar dos modos de defecto en $\lambda_{0c} = 649$ y 787 nm. Mientras que la MFP2 tiene una secuencia $(HL)^3H_{c_2}(LH)^6S$ donde la capa de defecto tiene un espesor de $d_{H_c} = 168$ nm para generar un solo modo de defecto en $\lambda_{0c} = 670$.

| Estructura | MFP1 | MFP2 |
|----------------------|------------------------|------------------------|
| Secuencia | $(HL)^3H_{c_1}(HL)^3S$ | $(HL)^3H_{c_2}(LH)^6S$ |
| λ_0 (nm) | 700 | 700 |
| λ_{0c} (nm) | 649, 787 | 670 |
| $\Delta\lambda$ (nm) | 311 | 235 |
| η_H | 1.73 | 1.73 |
| η_L | 1.20 | 1.20 |
| η_{H_c} | 2.10 | 1.73 |
| d_H (nm) | 102 | 102 |
| d_L (nm) | 146 | 146 |
| d_{H_c} (nm) | 330 | 167 |

Tabla 5.3: Parámetros de diseño para las MFPs.

| Estructura | MFP1 | MFP2 |
|--|------------------------|------------------------|
| Secuencia | $(HL)^3L_{c_1}(HL)^3S$ | $(HL)^3L_{c_2}(LH)^6S$ |
| Parámetros de anodización | | |
| $t_H \pm 0.05$ (s) | 16.87 | 12.28 |
| $t_L \pm 0.05$ (s) | 4.25 | 4.25 |
| t_{H_c} 0.05 (s) | 97.25 | 24.69 |
| J_H (mA/cm ²) ± 0.01 | 7.21 | 7.21 |
| J_L (mA/cm ²) ± 0.01 | 58.48 | 58.48 |
| J_c (mA/cm ²) ± 0.01 | 4.42 | 7.21 |
| Parámetros obtenidos | | |
| λ_0 (nm) | 700 | 707 |
| λ_{0c} (nm) | 649, 783 | 674 |
| $\Delta\lambda$ (nm) | 293 | 232 |
| p_H | 0.68 | 0.68 |
| p_L | 0.91 | 0.91 |
| p_{H_c} | 0.55 | 0.68 |
| d_H (nm) | 107 \pm 6 | 100 \pm 5 |
| d_L (nm) | 143 \pm 7 | 143 \pm 7 |
| d_{H_c} (nm) | 335 \pm 5 | 168 \pm 7 |
| σ_{HL} | 20 | 20 |

Tabla 5.4: Parámetros experimentales usados en la fabricación de MFP a base de PSi. Espesores determinados mediante SEM. Las porosidades y rugosidad fueron obtenidas mediante ajustes con GA. El ancho del PBG y la longitud de centrado de las cavidades fueron determinadas con los espectros de reflectancia.

La tabla 5.4 resume los parámetro de anodización usados para la fabricación de los dos prototipos de MFP, así como los parámetros experimentales obtenidos. Estos resultados muestran una desviación en las longitudes de onda del modo de defecto son de aproximadamente 4 nm. La figura 5.10 muestra el monitoreo *in-situ* mediante FA así como las imágenes de microscopía de sección

transversal para cada de las MFP. Debido al bajo contraste entre las porosidades de la capa H y la H_c de la MFP1 (ver figura 5.10b), la capa de defecto pareciera ser más grande, sin embargo se observa que el monitoreo con FA (figura 5.10a) es capaz de seguir la formación de la capa de defecto, que corresponde a dos ciclos FA, y después de ésta, claramente se ve la formación de las seis capas siguientes. En el caso de la MFP2 la secuencia que se utilizó fue $(HL)^3L_{c2}(LH)^6S$, la cual fue invertida después de la capa de defecto a bicapas (LH) , esta secuencia fue seleccionada para mejorar la reflectancia manteniendo la profundidad de la capa de defecto. La figura 5.10d muestra la microscopía de sección transversal de la MFP2 y la figura 5.10c muestra la señal FA durante la fabricación, la cual claramente muestra la formación de cada par de capa LH y la correspondiente capa de defecto.

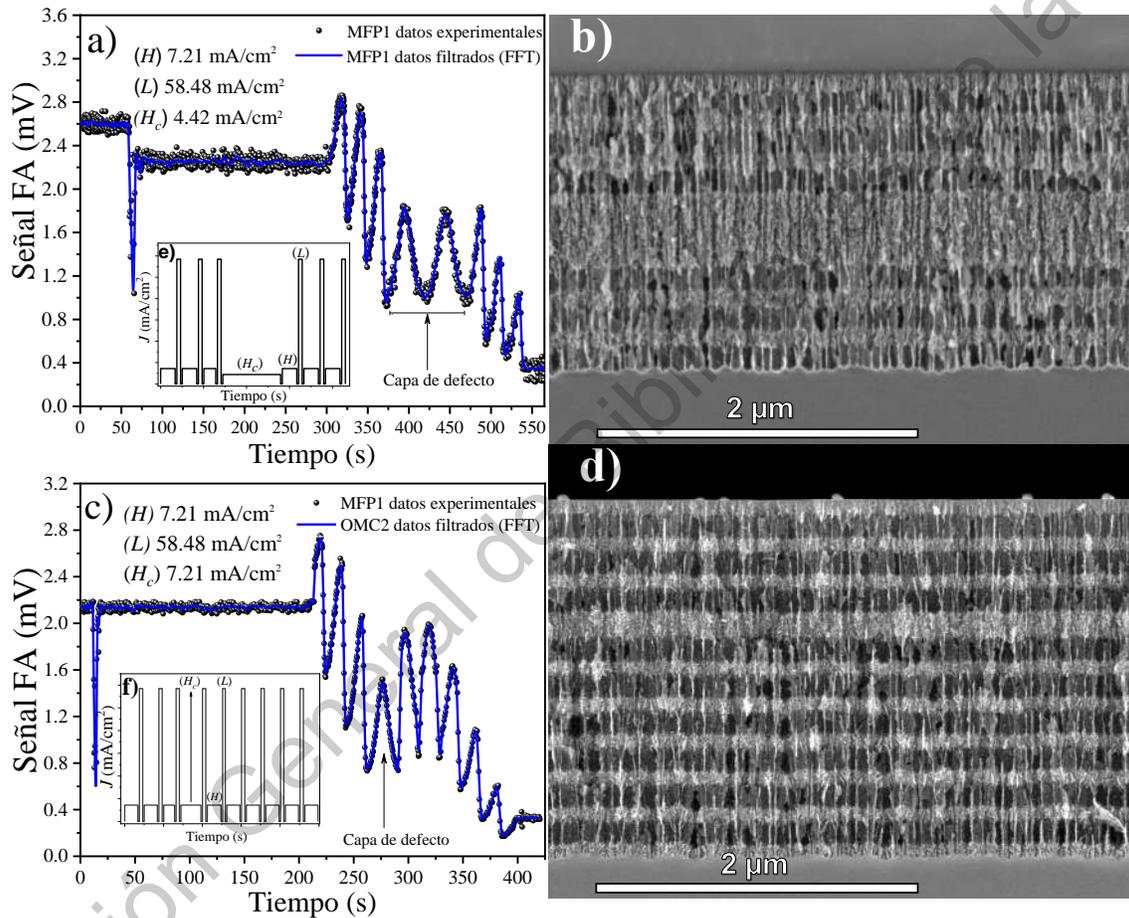


Figura 5.10: Señal FA producida durante la formación de las MFP: **a)** MFP1, y **c)** MFP2. Las figuras **b)** y **d)** muestran imágenes de sección transversal tomadas con SEM para cada MFP respectivamente. **e)** y **f)** representan el perfil de corriente utilizado para la fabricación de capa MFP respectivamente. Tomado y adaptado de [2].

Espectro de UV-Vis de cada MFP fue medido y se muestran en la figura 5.11. La figura 5.11a corresponde a la MFP1 y se puede observar la formación de dos modos de defecto en $\lambda_{0c} = 649$ y 783 nm, teniendo un corrimiento de 0 y 4 nm respectivamente comparado con las simulaciones. El ancho

de banda (FWHM) es de aproximadamente 27 y 32 nm, lo cual corresponde a un factor de calidad de 24 para ambas cavidades. La figura 5.11b muestra la respuesta óptica de la MFP2 de donde se observa que el modo de defecto está ubicado en $\lambda_{0c} = 674$ nm, que presenta un corrimiento de 4 nm en comparación con la simulación. El FWHM de esta estructura es de 16 nm, lo cual implica un factor de calidad de 42. Por lo tanto, la implementación de la secuencia en la MFP2 mejoró el factor de calidad.

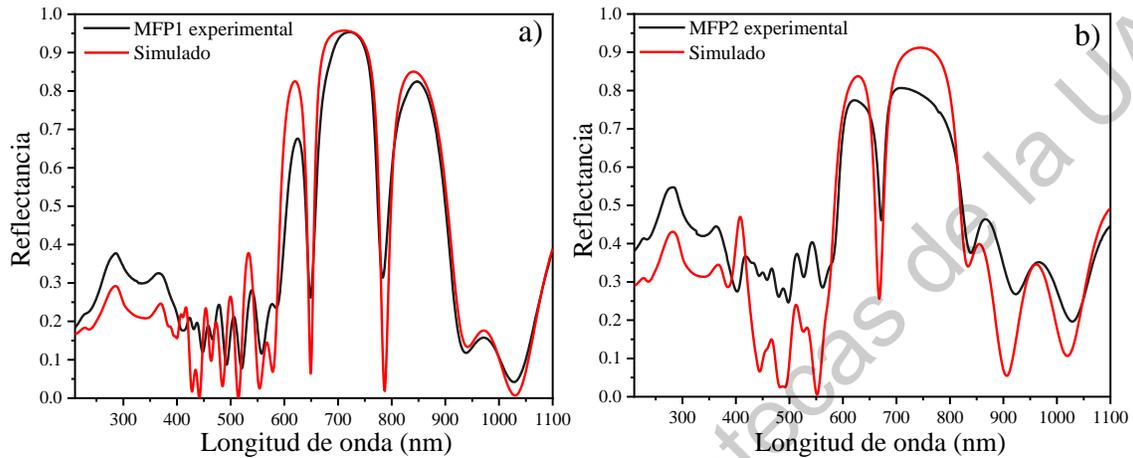


Figura 5.11: Espectros de reflectancia experimentales (negro) y simulados (rojo) para: a) MFP1 y b) MFP2. Tomado y adaptado de [2].

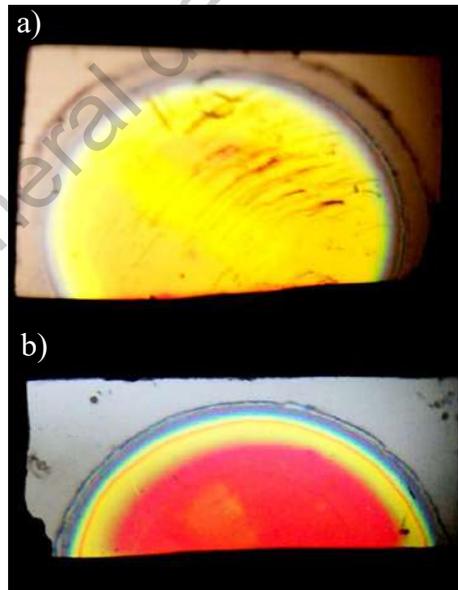


Figura 5.12: Fotos de las muestras de: a) MFP1 y b) MFP2.

La figura 5.12 muestra fotografías de las dos MFP fabricadas. De las figuras 5.10b y 5.10d se

puede observar que estas estructuras multicapa también presentan rugosidad interfacial. Se sabe que la rugosidad interfacial disminuye la cantidad de luz reflejada por el CF, sin embargo los efectos de ésta sobre un modo de defecto se desconocen. Para conocer los principales efectos de la rugosidad interfacial sobre el modo de defecto se hará un análisis parecido al de la sección 5.3. Se estudiarán los cambios producidos en la respuesta óptica en función de la rugosidad interfacial para tres MFP que presentan rugosidad en diferentes regiones. El primer caso, MFP1r, la cual presenta contribuciones de rugosidad en el primer conjunto de periodos (antes de la capa de defecto). El segundo caso, MFP2r, las contribuciones de la rugosidad se encuentran en el segundo conjunto de periodos (después de la capa de defecto), por último la MFP3r con contribuciones en todas las interfaces del CF. Se tomará como base la MFP2 para las tres simulaciones.

La figura 5.13 muestra la respuesta óptica de cada uno de los tres casos estudiados. Para la MFP1r (figura 5.13a), el principal efecto en el modo de defecto fue una disminución en la reflectancia de aproximadamente 0.8, esto es debido a que una parte de la radiación incidentes es dispersada antes de llegar a la capa de defecto, lo que causa una disminución general de la reflectancia para todo el espectro estudiado, incluyendo el PBG, el cual tuvo una disminución en la reflectancia de aproximadamente 0.13.

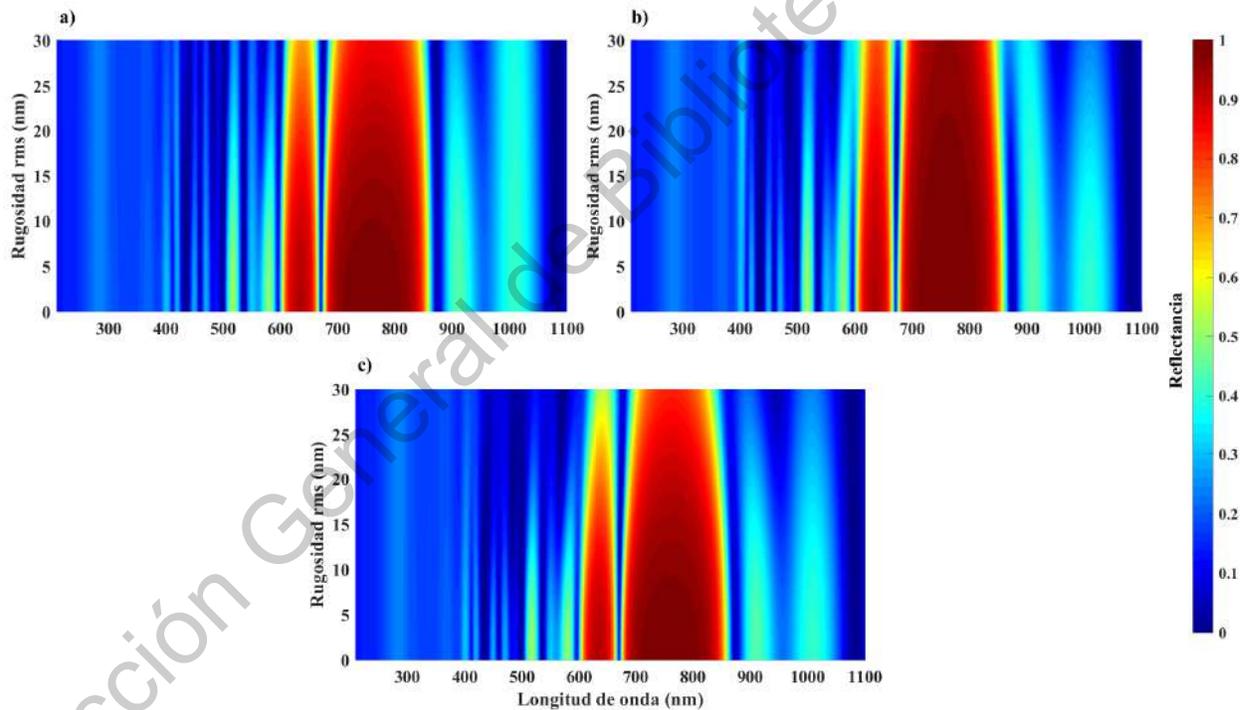


Figura 5.13: Efectos de la rugosidad en los diferentes casos analizados. **a)** MFP1r con contribuciones de rugosidad en el primer conjunto de periodos antes de la capa de defecto, **b)** MFP2r con contribuciones de rugosidad en el segundo conjunto de periodos y **c)** MFP3r con rugosidad en todas las interfaces. Tomado y adaptado de [3].

Para el caso de la MFP2r (figura 5.13b) ocurre lo contrario, debido a que el primer conjunto

de periodos no tiene rugosidad, la intensidad máxima del PGB se ve menos afectada, teniendo solo una disminución de 0.03. Mientras que la intensidad en reflectancia del modo de defecto es mayor, de 0.12 a 0.21, ya que la radiación que llega al segundo conjunto de periodos es dispersada en mayor medida por la mayor cantidad de periodos. Por último, para la MFP3r ocurre un efecto combinado de los dos casos anteriores, se tiene una disminución en la reflectancia total del PGB al igual que un aumento en la cantidad de radiación reflejada por el modo de defecto ya que todas las interfaces presentan rugosidad. El FWHM del modo de defecto, en todos los casos, presentó un aumento de tamaño.

Para hacer estos efectos más claros, en la figura 5.14 se muestran las relaciones de aspecto entre una MFP ideal sin rugosidad y cada caso estudiado. Se puede observar que para la MFP1r (figura 5.14a), la relación de aspecto es mayor a uno, mientras que para los demás casos (figuras 5.14b y 5.14c) es menor a uno, confirmando que las contribuciones de rugosidad en todas las capas disminuye el factor de calidad de una MFP ya que aumentan el FWHM de modo de defecto y disminuyen la reflectancia total del PGB. Sin embargo, la posición espectral del modo de defecto permanece constante para todos los casos, reafirmando que la rugosidad solo afecta la reflectancia y ni la posición espectral.

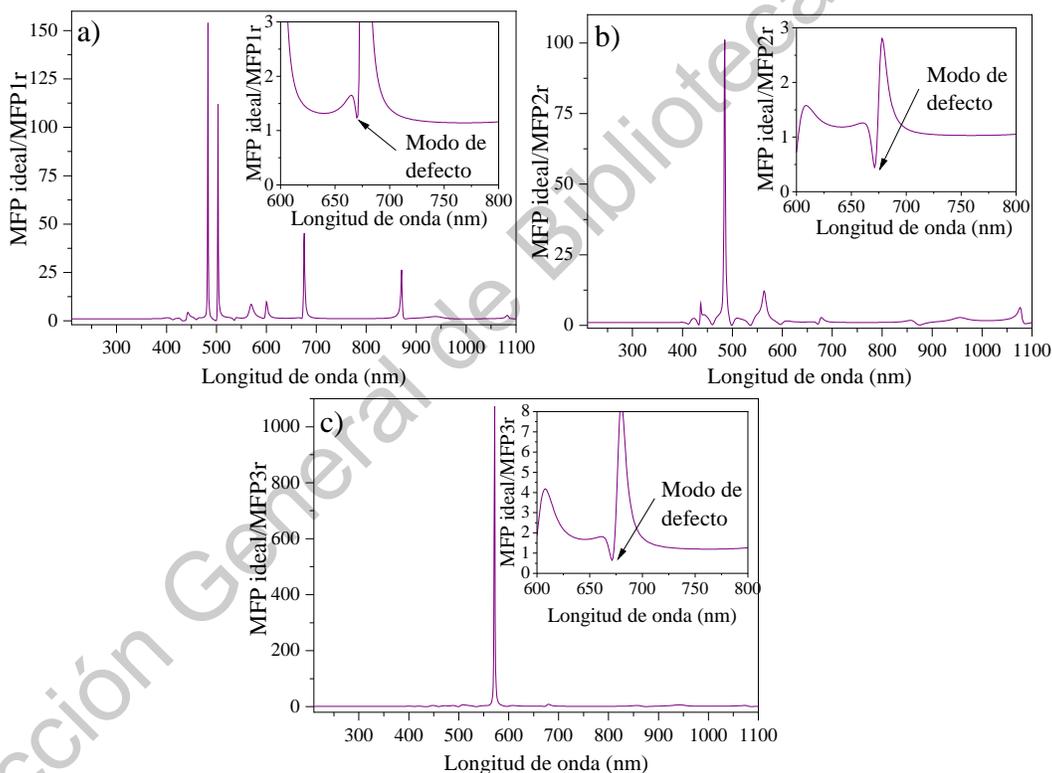


Figura 5.14: Contraste entre la reflectancia ideal y la reflectancia con contribuciones de rugosidad para: a) MFP1r, b) MFP2r y c) MFP3r. Tomado y adaptado de [3].

Cabe mencionar que hay otros factores relacionados con el proceso de fabricación que modifican las propiedades ópticas de estructuras multicapa fabricadas con PSi, por ejemplo, es sabido que la velocidad de crecimiento no se mantiene constante para tiempos de anodización largos [94, 112].

y que la porosidad presenta gradientes como función de la profundidad [113, 114]. Por otro lado, la composición química del electrolito cambia como consecuencia de las especies químicas con son liberadas durante la reacción [115]. Además, las interfaces entre capas presentan una capacitancia intrínseca [100] que puede almacenar energía y continuar con el proceso de anodización incluso cuando se a apagado la fuente de corriente, lo cual produce capas con espesores más grandes a los diseñados y por lo tanto generando corrimientos al rojo en los espectros de reflectancia. Una forma de reducir este efecto es la disminución monótona de la densidad de corriente como función del tiempo para compensar las cargas remanentes en las capas o disminuir el tiempo de anodización. Otro factor a tener en cuenta el la calidad del sustrato utilizado, ya que se ha demostrado que existen variaciones en la densidad de portadores mayoritarios en función de la posición [2] en una oblea de c-Si. Estos factores hacen que se siempre se presenten desviaciones respecto de los parámetros de diseño con los parámetros obtenidos, es por esto que se tener en cuenta una tolerancia de fabricación como un término para hacer referencia a posibles desviaciones en la respuesta óptica de los dispositivos. En este caso, se encontró que la respuesta óptica de los DBR se desvió aproximadamente 30 nm debido a un incremento en el camino óptico consecuencia de capas más grandes y se encontró que uno de los mayores efectos sobre el factor de calidad de una MFP es debido a la rugosidad interfacial. Estos efectos tiene más relevancia en la región del espectro visible que en el infrarrojo, ya que las desviaciones tienen un peso mayor debido a que son comparables con el tamaño de las capas y con la longitud de onda de resonancia.

5.5. Publicaciones

En el periodo de investigación de este proyecto se publicaron 3 artículos (ver Apéndice C)

1. **Effects of the interface roughness in the optical response of one-dimensional photonic crystals of porous silicon**

I.A. Lujan-Cabrera, C.F. Ramirez-Gutierrez, J.D. Castaño-Yepes, M.E. Rodriguez-Garcia
Physica B: Condensed Matter
doi.org/10.1016/j.physb.2019.02.010

2. **Design, fabrication, and optical characterization of onedimensional photonic crystals based on porous silicon assisted by in-situ photoacoustics**

C.F. Ramirez-Gutierrez, H.D. Martinez-Hernandez, I.A. Lujan-Cabrera, M.E. Rodriguez-García
Nature Publishing Group, Scientific reports
doi.org/10.1038/s41598-019-51200-1

3. **Comments on *Superstatistical properties of the one-dimensional Dirac oscillator* by Abdelmalek Boumali et al.**

J.D. Castaño-Yepes, I.A. Lujan-Cabrera, C.F. Ramirez-Gutierrez
Physica A: Statistical Mechanics and its Applications
doi.org/10.1016/j.physa.2020.125206

5.6. Trabajo futuro

Este trabajo se limitó al estudio de MFP basadas en PSi como resonadores pasivos con posible aplicación a láseres. Se diseñaron y fabricaron dos prototipos de MFP para su caracterización óptica y morfológica, sin embargo, la implementación de un medio activo en la microcavidad y un sistema de bombeo quedaron fuera del alcance de este trabajo de investigación.

Como trabajo futuro se pueden:

- Implementar metodologías para obtener interfaces con menos contribuciones de rugosidad y así mejorar la calidad óptica del resonador.
- Insertar un medio activo en la microcavidad para generar dispositivos emisores de luz.

Dirección General de Bibliotecas de la UAQ

Conclusiones

En este trabajo de investigación se presentó un estudio de microcavidades Fabry-Pérot (MFP) basadas en PSi para su aplicación en láseres. Se presentó una metodología completa para diseñar, fabricar y caracterizar cristales fotónicos (CF) en una dimensión basados en silicio poroso usando fotoacústica como método *in-situ* de monitoreo. Esta metodología consistió primeramente en la calibración de la celda electroquímica monitoreada con fotoacústica (FA) para relacionar los parámetros de tiempo de ciclo fotoacústicos, velocidad de crecimiento y porosidad con la densidad de corriente. Una vez realizado esto, se llevó a cabo el diseño y simulación de la respuesta óptica de los CF usando los formalismos del método de la matriz de transferencia y la teoría de medio efectivo para obtener los parámetros de fabricación de cada dispositivo diseñado.

Utilizando esta metodología se diseñaron y fabricaron seis cristales fotónicos en el espectro visible, tres reflectores de Bragg distribuidos (DBR) y dos MFP. Se mostró que la técnica FA es capaz de seguir la formación de las capas individuales e incluso de capas de defecto en el caso de las MFP.

Se encontró que el proceso de formación del PSi es altamente dependiente de factores externos como lo son la composición del electrolito, la temperatura y la calidad del sustrato. Estos factores tienen efecto sobre las propiedades estructurales y morfológicas de los CF, causando desviaciones en la porosidad y espesor de las capas, lo cual se vio reflejado en un corrimiento al rojo en la respuesta óptica de los CF comparada con las simulaciones. Además, los CF basados en PSi presentan otros factores que afectan su respuesta óptica como la absorción, el esparcimiento espacial superficial y de bulto, y absorción debida a confinamiento cuántico producido por las paredes de los poros. En este trabajo se hizo un estudio detallado de los efectos del esparcimiento superficial debido a la rugosidad de las interfaces en CF y se determinó que el mayor efecto es una reducción de la intensidad máxima reflejada y del ancho del bandgap fotónico en el caso de los DBR.

Para el caso de las MFP se encontró que la rugosidad y la cantidad de periodos que conforman la MFP modifican el ancho e intensidad de la microcavidad. La rugosidad principalmente tiene efectos sobre la intensidad de la banda, y la cantidad de periodos sobre el ancho de banda de la microcavidad. Por lo que es importante reducir la rugosidad de las interfaces para fabricar dispositivos con factores de calidad más altos, lo cual es necesario para su aplicación como resonadores pasivos en láseres.

La mayoría de las MFP basados en PSi son fabricados en el infrarrojo ya que el c-Si es menos dispersivo y absorbente en esta región comparado con el ultravioleta cercano y el espectro visible. Tomando esto en consideración, aunque la metodología propuesta permite el diseño y la fabricación de CF basados en PSi con alta precisión, los prototipos de resonadores en el espectro visible presentados en este trabajo de investigación presentan factores de calidad por debajo de los estándares requeridos para ser aplicados en la fabricación de láseres. Es por esto que se requieren estrategias para disminuir la rugosidad interfacial (por ejemplo, reduciendo la tensión superficial del electro-lito) e implementar secuencias en las estructuras de las MFP que maximicen el factor de calidad. Sin embargo, las MFP obtenidas presentan factores de calidad adecuados para ser utilizadas como detectores ópticos pasivos.

Bibliografía

- [1] J. Joannopoulos, P. R. Villeneuve, and S. Fan, “Photonic crystals,” *Solid State Communications*, vol. 102, no. 2, pp. 165 – 173, 1997. Highlights in Condensed Matter Physics and Materials Science.
- [2] C. F. Ramirez-Gutierrez, H. D. Martinez-Hernandez, I. A. Lujan-Cabrera, and M. E. Rodriguez-García, “Design, fabrication, and optical characterization of one-dimensional photonic crystals based on porous silicon assisted by in-situ photoacoustics,” *Scientific reports*, vol. 9, no. 1, pp. 1–15, 2019.
- [3] I. A. Lujan-Cabrera, C. F. Ramirez-Gutierrez, J. D. Castaño-Yepes, and M. E. Rodriguez-Garcia, “Effects of the interface roughness in the optical response of one-dimensional photonic crystals of porous silicon,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 560, pp. 133 – 139, 2019.
- [4] J. Hecht, “A short history of laser development,” *Applied optics*, vol. 49, no. 25, pp. F99–F122, 2010.
- [5] A. Hernandez, P. Dominguez, O. Cruz, R. Ivanov, C. Carballo, B. Zepeda, *et al.*, “Laser in agriculture,” *Int. Agrophys*, vol. 24, no. 4, pp. 407–422, 2010.
- [6] A. Schwaighofer, M. Brandstetter, and B. Lendl, “Quantum cascade lasers (qcls) in biomedical spectroscopy,” *Chemical Society Reviews*, vol. 46, no. 19, pp. 5903–5924, 2017.
- [7] P. Spectra, *A History of the Laser: 1960 - 2019*, 2019. https://www.photonics.com/Articles/A_History_of_the_Laser_1960_-_2019/a42279.
- [8] W. T. Silfvast, *Laser fundamentals*. Cambridge university press, 2004.
- [9] O. Svelto and D. C. Hanna, *Principles of lasers*, vol. 1. Springer, 2010.
- [10] K. J. Vahala, “Optical microcavities,” *nature*, vol. 424, no. 6950, pp. 839–846, 2003.
- [11] C. Fabry and A. Pérot, “Theorie et applications d’une nouvelle methods de spectroscopie interferentielle,” *Ann. Chim. et de Phys*, vol. 16, pp. 115–144, 1899.
- [12] J. Moloney, J. Hader, and S. Koch, “Quantum design of semiconductor active materials: laser and amplifier applications,” *Laser & Photonics Reviews*, vol. 1, no. 1, pp. 24–43, 2007.
- [13] W. W. Chow and S. W. Koch, *Semiconductor-laser fundamentals: physics of the gain materials*. Springer Science & Business Media, 1999.

- [14] M. Lončar, T. Yoshie, A. Scherer, P. Gogna, and Y. Qiu, “Low-threshold photonic crystal laser,” *Applied Physics Letters*, vol. 81, no. 15, pp. 2680–2682, 2002.
- [15] J. Vučković, M. Lončar, H. Mabuchi, and A. Scherer, “Design of photonic crystal microcavities for cavity qed,” *Phys. Rev. E*, vol. 65, p. 016608, Dec 2001.
- [16] K. Srinivasan and O. Painter, “Momentum space design of high-q photonic crystal optical cavities,” *Opt. Express*, vol. 10, pp. 670–684, Jul 2002.
- [17] O. Painter, R. Lee, A. Scherer, A. Yariv, J. O’Brien, P. Dapkus, and I. Kim, “Two-dimensional photonic band-gap defect mode laser,” *Science*, vol. 284, no. 5421, pp. 1819–1821, 1999.
- [18] R. Eichmann, B. Pasenow, T. Meier, T. Stroucken, P. Thomas, and S. W. Koch, “Semiconductor absorption in photonic crystals,” *Applied Physics Letters*, vol. 82, no. 3, pp. 355–357, 2003.
- [19] M. Yoshida, M. De Zoysa, K. Ishizaki, Y. Tanaka, M. Kawasaki, R. Hatsuda, B. Song, J. Gellera, and S. Noda, “Double-lattice photonic-crystal resonators enabling high-brightness semiconductor lasers with symmetric narrow-divergence beams,” *Nature materials*, vol. 18, no. 2, pp. 121–128, 2019.
- [20] D. Qi, X. Wang, Y. Cheng, F. Chen, L. Liu, and R. Gong, “Quasi-periodic photonic crystal fabry-perot optical filter based on si/sio₂ for visible-laser spectral selectivity,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 51, no. 22, p. 225103, 2018.
- [21] L. T. Canham, “Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers,” *Applied Physics Letters*, vol. 57, no. 10, pp. 1046–1048, 1990.
- [22] A. Cullis and L. Canham, “Visible light emission due to quantum size effects in highly porous crystalline silicon,” *Nature*, vol. 353, no. 6342, pp. 335–338, 1991.
- [23] V. Mulloni and L. Pavesi, “Porous silicon microcavities as optical chemical sensors,” *Applied Physics Letters*, vol. 76, no. 18, pp. 2523–2525, 2000.
- [24] G. Rong, J. D. Ryckman, R. L. Mernaugh, and S. M. Weiss, “Label-free porous silicon membrane waveguide for dna sensing,” *Applied Physics Letters*, vol. 93, no. 16, p. 161109, 2008.
- [25] G. Korotcenkov and B. K. Cho, “Porous semiconductors: Advanced material for gas sensor applications,” *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, vol. 35, no. 1, pp. 1–37, 2010.
- [26] J.-H. Park, G. von Maltzahn, L. L. Ong, A. Centrone, T. A. Hatton, E. Ruoslahti, S. N. Bhatia, and M. J. Sailor, “Cooperative nanoparticles for tumor detection and photothermally triggered drug delivery,” *Advanced Materials*, vol. 22, no. 8, pp. 880–885, 2010.
- [27] L. Gu, D. J. Hall, Z. Qin, E. Anglin, J. Joo, D. J. Mooney, S. B. Howell, and M. J. Sailor, “In vivo time-gated fluorescence imaging with biodegradable luminescent porous silicon nanoparticles,” *Nature communications*, vol. 4, no. 1, pp. 1–7, 2013.
- [28] D. Estrada-Wiese, J. del Río, R. Nava, J. Gómez-Ocampo, J. Tagüeña-Martínez, and Z. Montiel-González, “Staggered padé wavelength distribution for multi-bragg photonic mirrors,” *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 141, pp. 315 – 321, 2015.

- [29] P. J. Reece, G. L erondel, W. H. Zheng, and M. Gal, "Optical microcavities with subnanometer linewidths based on porous silicon," *Applied Physics Letters*, vol. 81, no. 26, pp. 4895–4897, 2002.
- [30] M. Ghulinyan, C. J. Oton, G. Bonetti, Z. Gaburro, and L. Pavesi, "Free-standing porous silicon single and multiple optical cavities," *Journal of Applied Physics*, vol. 93, no. 12, pp. 9724–9729, 2003.
- [31] W. H. Zheng, P. Reece, B. Q. Sun, and M. Gal, "Broadband laser mirrors made from porous silicon," *Applied Physics Letters*, vol. 84, no. 18, pp. 3519–3521, 2004.
- [32] H. Ning, N. A. Krueger, X. Sheng, H. Keum, C. Zhang, K. D. Choquette, X. Li, S. Kim, J. A. Rogers, and P. V. Braun, "Transfer-printing of tunable porous silicon microcavities with embedded emitters," *ACS Photonics*, vol. 1, no. 11, pp. 1144–1150, 2014.
- [33] V. Robbiano, G. M. Patern , A. A. La Mattina, S. G. Motti, G. Lanzani, F. Scotognella, and G. Barillaro, "Room-temperature low-threshold lasing from monolithically integrated nanostructured porous silicon hybrid microcavities," *ACS Nano*, vol. 12, no. 5, pp. 4536–4544, 2018. PMID: 29727169.
- [34] J. P. Gordon, H. J. Zeiger, and C. H. Townes, "The maser—new type of microwave amplifier, frequency standard, and spectrometer," *Phys. Rev.*, vol. 99, pp. 1264–1274, Aug 1955.
- [35] N. V. Karlov, O. N. Krokhin, and S. G. Lukishova, "History of quantum electronics at the moscow lebedev and general physics institutes: Nikolaj basov and alexander prokhorov," *Appl. Opt.*, vol. 49, no. 25, pp. F32–F46, 2010.
- [36] T. H. Maiman, "Stimulated optical radiation in ruby," *nature*, vol. 187, no. 4736, pp. 493–494, 1960.
- [37] K. Tomiyasu, "Neodymium laser," in *The Laser Literature*, pp. 16–20, Springer, 1968.
- [38] G. Di Massa, L. Boccia, and G. Amendola, "Gaussian beam antennas based on open resonator structures," in *2005 IEEE Antennas and Propagation Society International Symposium*, vol. 3A, pp. 630–633 vol. 3A, 2005.
- [39] J. Hu, X. Sun, A. Agarwal, and L. C. Kimerling, "Design guidelines for optical resonator biochemical sensors," *JOSA B*, vol. 26, no. 5, pp. 1032–1041, 2009.
- [40] G. T. di Francia, "Optical resonators," *Optica Acta: International Journal of Optics*, vol. 13, no. 4, pp. 323–342, 1966.
- [41] N. Hodgson and H. Weber, *Optical resonators: fundamentals, advanced concepts, applications*, vol. 108. Springer Science & Business Media, 2005.
- [42] N. Ismail, C. C. Kores, D. Geskus, and M. Pollnau, "Fabry-p erot resonator: spectral line shapes, generic and related airy distributions, linewidths, finesses, and performance at low or frequency-dependent reflectivity," *Opt. Express*, vol. 24, pp. 16366–16389, Jul 2016.
- [43] Z.-g. Liu, "Fabry-perot resonator antenna," *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, vol. 31, no. 4, pp. 391–403, 2010.

- [44] S. Setzu, P. Ferrand, and R. Romestain, "Optical properties of multilayered porous silicon," *Materials Science and Engineering: B*, vol. 69-70, pp. 34 – 42, 2000.
- [45] G. Palestino, R. Legros, V. Agarwal, E. Pérez, and C. Gergely, "Functionalization of nanostructured porous silicon microcavities for glucose oxidase detection," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 135, no. 1, pp. 27 – 34, 2008.
- [46] I. Melngailis, "Longitudinal injection-plasma laser of insb," *Applied Physics Letters*, vol. 6, no. 3, pp. 59–60, 1965.
- [47] R. Burnham, D. Scifres, and W. Streifer, "Single-heterostructure distributed-feedback gas-diode lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 11, no. 7, pp. 439–449, 1975.
- [48] Z. H. Alferov, V. Andreyev, S. Gurevich, R. Kazarinov, V. Larionov, M. Mizerov, and E. Portnoy, "Semiconductor lasers with the light output through the diffraction grating on the surface of the waveguide layer," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 11, no. 7, pp. 449–451, 1975.
- [49] J. L. Jewell, A. Scherer, S. L. McCall, Y. H. Lee, S. Walker, J. P. Harbison, and L. T. Florez, "Low-threshold electrically pumped vertical-cavity surface-emitting microlasers," *Electronics Letters*, vol. 25, no. 17, pp. 1123–1124, 1989.
- [50] S. L. Chuang, *Physics of photonic devices*, vol. 80. John Wiley & Sons, 2012.
- [51] G. Chapuis and C. P. Brock, *The IUCr Online Dictionary of Crystallography*, 2019. <https://www.iucr.org/news/newsletter/volume-27/number-1/the-iucr-online-dictionary-of-crystallography>
- [52] R. Meade, J. N. Winn, and J. Joannopoulos, *Photonic crystals: Molding the flow of light*. Princeton University Press Princeton, NJ, 1995.
- [53] I. A. Sukhoivanov and I. V. Guryev, *Photonic crystals: physics and practical modeling*, vol. 152. Springer, 2009.
- [54] C. Kittel and P. McEuen, *Introduction to solid state physics*, vol. 8. Wiley New York, 1976.
- [55] K. Sakoda, *Optical properties of photonic crystals*, vol. 80. Springer Science & Business Media, 2004.
- [56] H. Benisty, V. Berger, J.-M. Gérard, D. Maystre, and A. Tchelnokov, *Photonic Crystals, Towards Nanoscale Photonic Devices*. Springer, 2005.
- [57] Y. Katznelson, *An introduction to harmonic analysis*. Cambridge University Press, 2004.
- [58] F. Segovia-Chaves and H. Vinck-Posada, "The effect of the hydrostatic pressure and temperature on the defect mode in the band structure of one-dimensional photonic crystal," *Optik*, vol. 156, pp. 981 – 987, 2018.
- [59] S. Shi, C. Chen, and D. W. Prather, "Plane-wave expansion method for calculating band structure of photonic crystal slabs with perfectly matched layers," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 21, pp. 1769–1775, Sep 2004.

- [60] M. Qiu and S. He, “FDTD algorithm for computing the off-plane band structure in a two-dimensional photonic crystal with dielectric or metallic inclusions,” *Physics Letters A*, vol. 278, no. 6, pp. 348 – 354, 2001.
- [61] Y. Cao, Z. Hou, and Y. Liu, “Finite difference time domain method for band-structure calculations of two-dimensional phononic crystals,” *Solid State Communications*, vol. 132, no. 8, pp. 539 – 543, 2004.
- [62] J. Manzanares-Martinez, P. Castro-Garay, D. Moctezuma-Enriquez, R. Archuleta-Garcia, and M. Velarde-Chong, “Complex band structure in one-dimensional photonic heterostructures,” *Advanced Studies in Theoretical Physics*, pp. 759–772, Dec. 2010.
- [63] T.-W. Chang, J.-J. Wu, and C.-J. Wu, “Complex photonic band structures in a photonic crystal containing lossy semiconductor insb,” *Progress In Electromagnetics Research*, vol. 131, pp. 153–167, 2012.
- [64] L. Wu, F. Zhuang, and S. He, “Degeneracy analysis for a supercell of a photonic crystal and its application to the creation of band gaps,” *Phys. Rev. E*, vol. 67, p. 026612, Feb 2003.
- [65] F. Segovia-Chaves and H. Vinck-Posada, “Temperature dependence of defect mode in band structures of the one-dimensional photonic crystal,” *Optik*, vol. 154, pp. 467 – 472, 2018.
- [66] V. A. Markel, “Introduction to the maxwell garnett approximation: tutorial,” *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 33, no. 7, pp. 1244–1256, 2016.
- [67] M. Wang and N. Pan, “Predictions of effective physical properties of complex multiphase materials,” *Materials Science and Engineering: R: Reports*, vol. 63, no. 1, pp. 1 – 30, 2008.
- [68] T. C. Choy, *Effective Medium Theory Principles and Applications*, pp. 1–24. Oxford University Press, 2 ed., 2016.
- [69] X.-D. Liu, Z.-L. Hou, B.-X. Zhang, K.-T. Zhan, P. He, K.-L. Zhang, and W.-L. Song, “A general model of dielectric constant for porous materials,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 108, no. 10, p. 102902, 2016.
- [70] C. Ramirez-Gutierrez, J. Castaño-Yepes, and M. Rodriguez-Garcia, “Porosity and roughness determination of porous silicon thin films by genetic algorithms,” *Optik*, vol. 173, pp. 271 – 278, 2018.
- [71] Z. Knittel, *Optics of Thin Films*. Wiley, London, 1976.
- [72] C. L. Mitsas and D. I. Siapkas, “Generalized matrix method for analysis of coherent and incoherent reflectance and transmittance of multilayer structures with rough surfaces, interfaces, and finite substrates,” *Appl. Opt.*, vol. 34, pp. 1678–1683, Apr 1995.
- [73] T. Starkey and P. Vukusic, “Light manipulation principles in biological photonic systems,” *Nanophotonics*, vol. 2, no. 4, pp. 289 – 307, 01 Oct. 2013.
- [74] J. Rouquerol, D. Avnir, C. W. Fairbridge, D. H. Everett, J. M. Haynes, N. Pernicone, J. D. F. Ramsay, K. S. W. Sing, and K. K. Unger, “Recommendations for the characterization of porous solids (technical report),” *Pure and Applied Chemistry*, vol. 66, no. 8, pp. 1739 – 1758, 1994.

- [75] M. Thommes, K. Kaneko, A. V. Neimark, J. P. Olivier, F. Rodriguez-Reinoso, J. Rouquerol, and K. S. Sing, "Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (iupac technical report)," *Pure and Applied Chemistry*, vol. 87, no. 9-10, pp. 1051 – 1069, 2015.
- [76] A. Uhler Jr., "Electrolytic shaping of germanium and silicon," *Bell System Technical Journal*, vol. 35, no. 2, pp. 333–347, 1956.
- [77] D. R. Turner, "Electropolishing silicon in hydrofluoric acid solutions," *Journal of The Electrochemical Society*, vol. 105, no. 7, p. 402, 1958.
- [78] G. Korotcenkov, *Porous silicon: from formation to application: formation and properties, Volume One*. CRC Press, 2016.
- [79] H. Takai and T. Itoh, "Porous silicon layers and its oxide for the silicon-on-insulator structure," *Journal of Applied Physics*, vol. 60, no. 1, pp. 222–225, 1986.
- [80] A. Dillon, P. Gupta, M. Robinson, A. Bracker, and S. George, "Ftir studies of water and ammonia decomposition on silicon surfaces," *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, vol. 54-55, pp. 1085 – 1095, 1990.
- [81] L. T. Canham and A. J. Groszek, "Characterization of microporous si by flow calorimetry: Comparison with a hydrophobic sio2 molecular sieve," *Journal of Applied Physics*, vol. 72, no. 4, pp. 1558–1565, 1992.
- [82] M. J. J. Theunissen, "Etch channel formation during anodic dissolution of n-type silicon in aqueous hydrofluoric acid," *Journal of The Electrochemical Society*, vol. 119, no. 3, p. 351, 1972.
- [83] L. Canham, *Handbook of porous silicon*. Springer, 2014.
- [84] M. J. Sailor, *Porous silicon in practice: preparation, characterization and applications*. John Wiley & Sons, 2012.
- [85] V. Lehmann and U. Gösele, "Porous silicon formation: A quantum wire effect," *Applied Physics Letters*, vol. 58, no. 8, pp. 856–858, 1991.
- [86] V. Lehmann, *Electrochemistry of silicon: instrumentation, science, materials and applications*. Wiley-VCH, 2002.
- [87] R. L. Smith and S. D. Collins, "Porous silicon formation mechanisms," *Journal of Applied Physics*, vol. 71, no. 8, pp. R1–R22, 1992.
- [88] W. Kern, *Handbook of Silicon Wafer Cleaning Technology (Third Edition)*. William Andrew Publishing, third edition ed., 2018.
- [89] A. Rosencwaig and A. Gersho, "Theory of the photoacoustic effect with solids," *Journal of Applied Physics*, vol. 47, no. 1, pp. 64–69, 1976.
- [90] A. Hordvik and H. Schlossberg, "Photoacoustic technique for determining optical absorption coefficients in solids," *Appl. Opt.*, vol. 16, no. 1, pp. 101–107, 1977.

- [91] O. Pessoa, C. L. Cesar, N. A. Patel, H. Vargas, C. C. Ghizoni, and L. C. M. Miranda, "Two-beam photoacoustic phase measurement of the thermal diffusivity of solids," *Journal of Applied Physics*, vol. 59, no. 4, pp. 1316–1318, 1986.
- [92] M. Alaeian, H. R. B. Orlande, and B. Lamien, "Application of the photoacoustic technique for temperature measurements during hyperthermia," *Inverse Problems in Science and Engineering*, vol. 27, no. 12, pp. 1651–1671, 2019.
- [93] I. Steinberg, D. M. Huland, O. Vermesh, H. E. Frostig, W. S. Tummers, and S. S. Gambhir, "Photoacoustic clinical imaging," *Photoacoustics*, vol. 14, pp. 77 – 98, 2019.
- [94] C. F. Ramirez-Gutierrez, J. D. Castaño-Yepes, and M. E. Rodriguez-García, "Modeling the photoacoustic signal during the porous silicon formation," *Journal of Applied Physics*, vol. 121, no. 2, p. 025103, 2017.
- [95] C. F. Ramirez-Gutierrez, J. D. Castaño-Yepes, and M. E. Rodriguez-García, "In situ photoacoustic characterization for porous silicon growing: Detection principles," *Journal of Applied Physics*, vol. 119, no. 18, p. 185103, 2016.
- [96] C. Pacholski, M. Sartor, M. J. Sailor, F. Cunin, and G. M. Miskelly, "Biosensing using porous silicon double-layer interferometers: reflective interferometric fourier transform spectroscopy," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 127, no. 33, pp. 11636–11645, 2005.
- [97] R. A. Smith, "Fluorine compounds, inorganic, hydrogen," *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*, 2000.
- [98] A. E. Pap, K. Kordás, J. Vähäkangas, A. Uusimäki, S. Leppävuori, L. Pilon, and S. Szatmári, "Optical properties of porous silicon. part iii: Comparison of experimental and theoretical results," *Optical Materials*, vol. 28, no. 5, pp. 506 – 513, 2006.
- [99] M. A. Green, "Self-consistent optical parameters of intrinsic silicon at 300k including temperature coefficients," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 92, no. 11, pp. 1305 – 1310, 2008.
- [100] R. L. Meek, "n+ silicon-electrolyte interface capacitance," *Surface Science*, vol. 25, no. 3, pp. 526 – 536, 1971.
- [101] A. Mogoda and Y. Ahmad, "Electrochemical impedance study of porous silicon prepared by metal-assisted chemical etching," *Silicon*, vol. 11, no. 6, pp. 2837–2844, 2019.
- [102] T. C. Do, H. Bui, T. V. Nguyen, T. A. Nguyen, T. H. Nguyen, and V. H. Pham, "A micro-cavity based on a porous silicon multilayer," *Advances in Natural Sciences: Nanoscience and Nanotechnology*, vol. 2, p. 035001, jun 2011.
- [103] I. Giunttoni, A. Gajda, M. Krause, R. Steingrüber, J. Bruns, and K. Petermann, "Tunable bragg reflectors on silicon-on-insulator rib waveguides," *Opt. Express*, vol. 17, pp. 18518–18524, Oct 2009.
- [104] X. Zhao, S.-Y. Lee, J. Choi, S.-H. Lee, I.-K. Shin, and C.-U. Jeon, "Minimization of line edge roughness and critical dimension error in electron-beam lithography," *Journal of Vacuum Science & Technology B*, vol. 32, no. 6, p. 06F505, 2014.

- [105] X. Zhao, S.-Y. Lee, J. Choi, S.-H. Lee, I.-K. Shin, C.-U. Jeon, B.-G. Kim, and H.-K. Cho, "Dependency analysis of line edge roughness in electron-beam lithography," *Microelectronic Engineering*, vol. 133, pp. 78 – 87, 2015.
- [106] L. G. Cenchá, C. Antonio Hernández, L. Forzani, R. Urteaga, and R. R. Koropecski, "Optical performance of hybrid porous silicon–porous alumina multilayers," *Journal of Applied Physics*, vol. 123, no. 18, p. 183101, 2018.
- [107] K. R. Maskaly, G. R. Maskaly, W. C. Carter, and J. L. Maxwell, "Diminished normal reflectivity of one-dimensional photonic crystals due to dielectric interfacial roughness," *Opt. Lett.*, vol. 29, no. 23, pp. 2791–2793, 2004.
- [108] K. R. Maskaly, W. C. Carter, R. D. Averitt, and J. L. Maxwell, "The effect of interfacial roughness on the normal incidence bandgap of one-dimensional photonic crystals," *Opt. Express*, vol. 13, no. 21, pp. 8380–8389, 2005.
- [109] H. Davies, "The reflection of electromagnetic waves from a rough surface," *Proceedings of the IEE - Part IV: Institution Monographs*, vol. 101, no. 7, pp. 209–214, 1954.
- [110] H. E. Bennett and J. O. Porteus, "Relation between surface roughness and specular reflectance at normal incidence," *J. Opt. Soc. Am.*, vol. 51, pp. 123–129, Feb 1961.
- [111] I. Filiński, "The effects of sample imperfections on optical spectra," *physica status solidi (b)*, vol. 49, no. 2, pp. 577–588, 1972.
- [112] C. F. Ramirez-Gutierrez, J. D. Castaño-Yepes, and M. E. Rodriguez-Garcia, "Optical interferometry and photoacoustics as in-situ techniques to characterize the porous silicon formation: a review," *Open Material Sciences*, vol. 4, no. 1, pp. 23 – 32, 01 Jul. 2018.
- [113] D. R. Huanca, F. J. Ramirez-Fernandez, and W. J. Salcedo, "Porous silicon optical cavity structure applied to high sensitivity organic solvent sensor," *Microelectronics Journal*, vol. 39, no. 3, pp. 499 – 506, 2008. The Sixth International Conference on Low Dimensional Structures and Devices.
- [114] J. Caballero-Hernández, V. Godinho, B. Lacroix, M. C. Jiménez de Haro, D. Jamon, and A. Fernández, "Fabrication of optical multilayer devices from porous silicon coatings with closed porosity by magnetron sputtering," *ACS Applied Materials & Interfaces*, vol. 7, no. 25, pp. 13889–13897, 2015.
- [115] H. Föll, M. Christophersen, J. Carstensen, and G. Hasse, "Formation and application of porous silicon," *Materials Science and Engineering: R: Reports*, vol. 39, no. 4, pp. 93 – 141, 2002.

Fotoacústica

Serie de calibración 1 (S1)

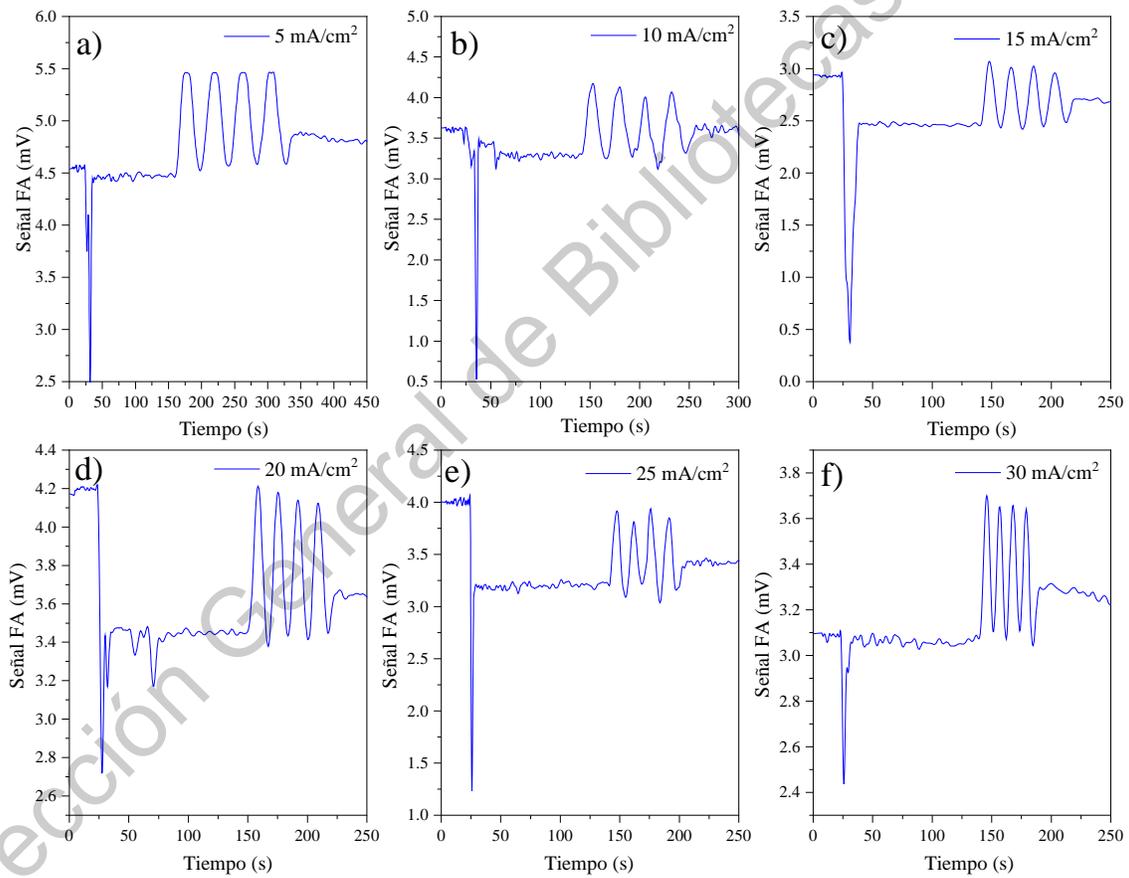


Figura A.1: Señales FA *in-situ* de la serie de calibración S1 de las muestras a) 5 mA/cm², b) 10 mA/cm², c) 15 mA/cm², d) 20 mA/cm², e) 25 mA/cm² y f) 30 mA/cm².

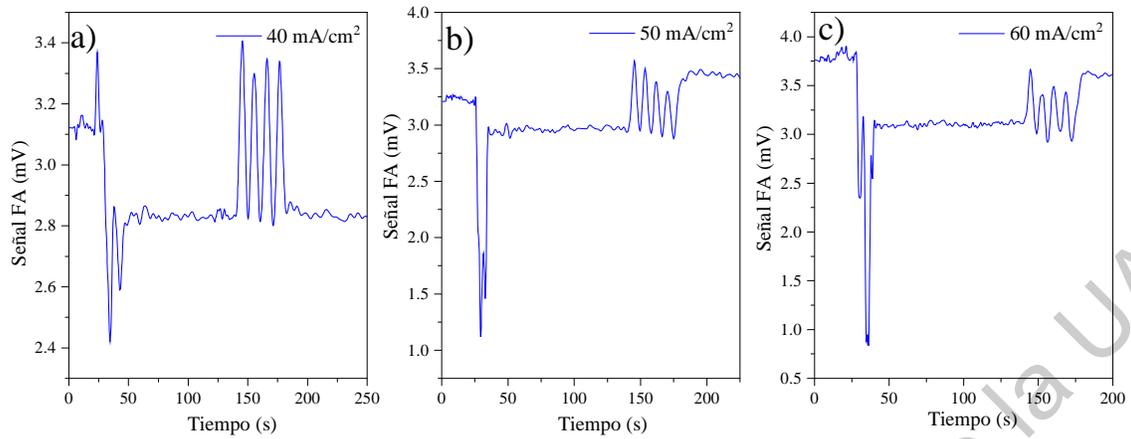


Figura A.2: Señales FA *in-situ* de la serie de calibración S1 de las muestras a) 40 mA/cm², b) 50 mA/cm² y c) 60 mA/cm².

Dirección General de Bibliotecas de la UAQ

Serie de calibración 2 (S2)

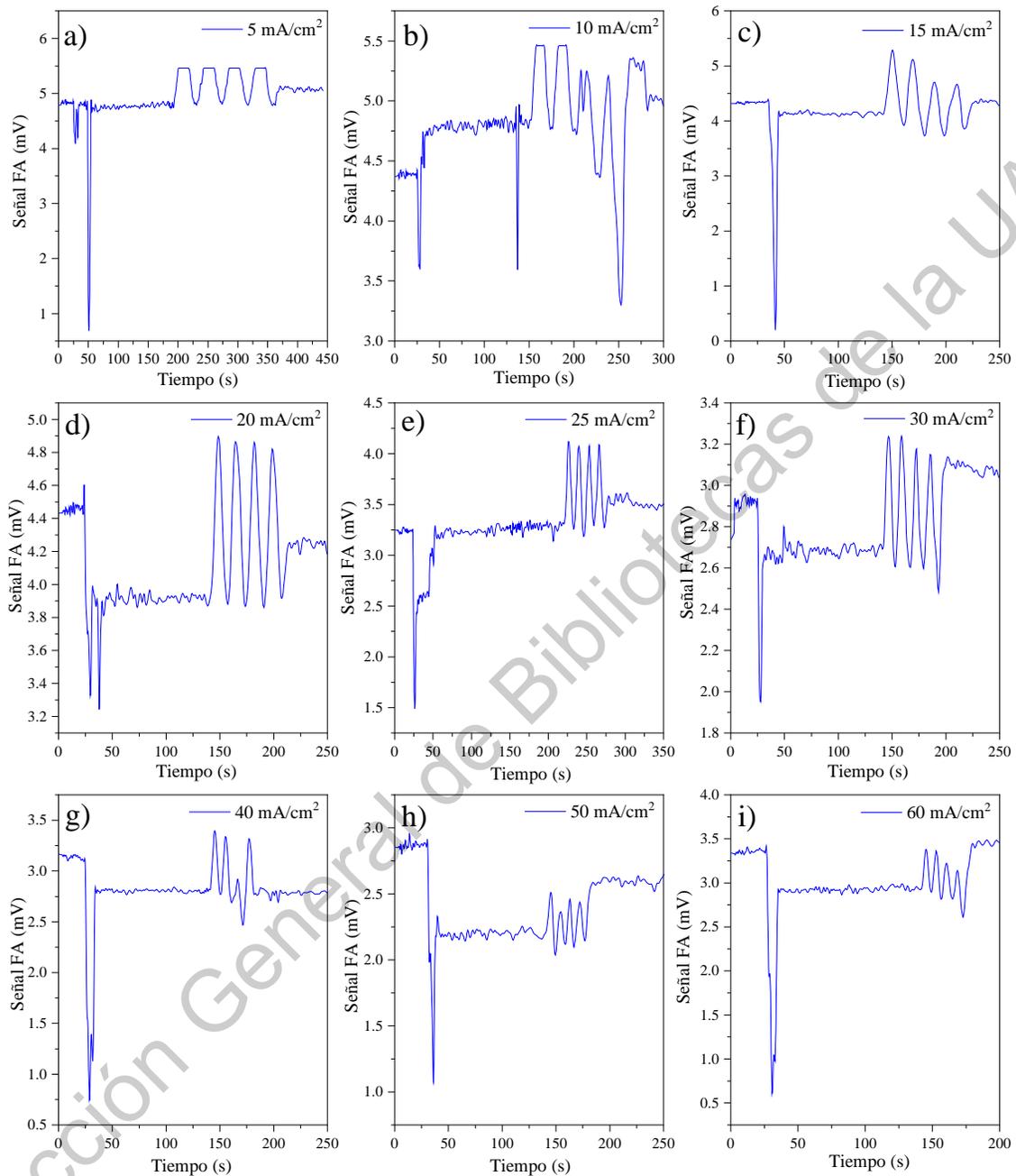


Figura A.3: Señales FA *in-situ* de la serie de calibración S2 de las muestras a) 5 mA/cm², b) 10 mA/cm², c) 15 mA/cm², d) 20 mA/cm², e) 25 mA/cm², f) 30 mA/cm², g) 40 mA/cm², h) 50 mA/cm², i) 60 mA/cm².

Espectroscopía Uv-Vis

Serie de calibración 1 (S1)

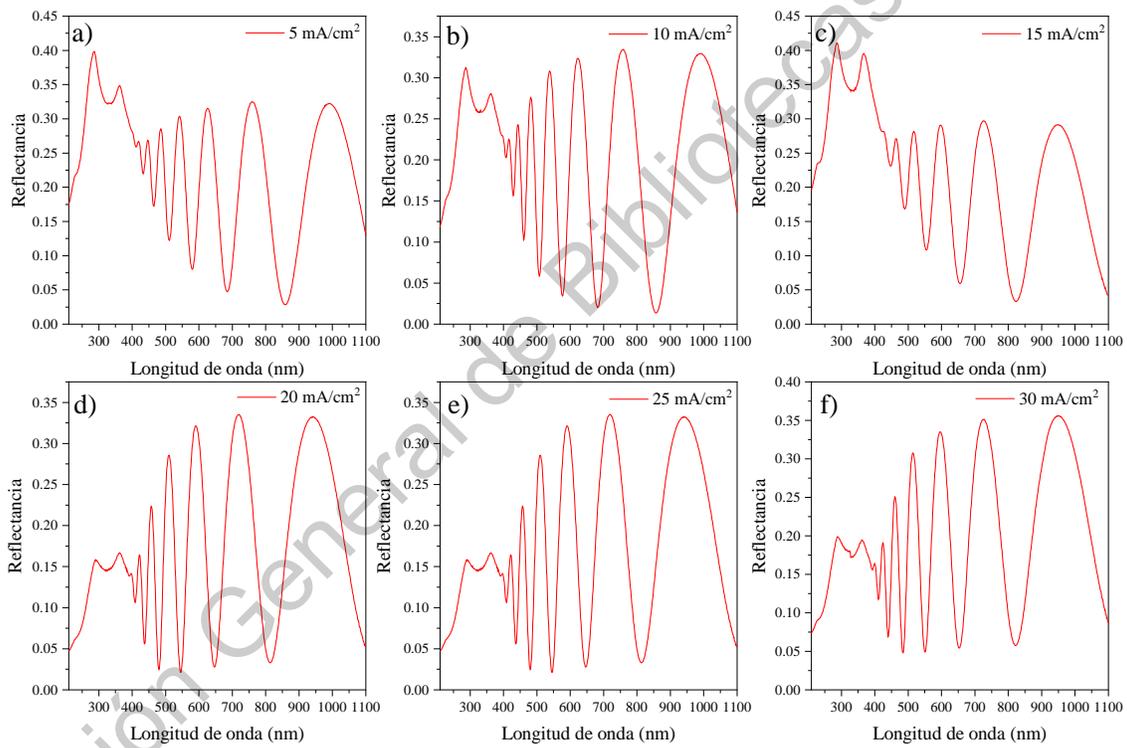


Figura B.1: Espectros de reflectancia de la serie de calibración S1 de las muestras **a)** 5 mA/cm², **b)** 10 mA/cm², **c)** 15 mA/cm², **d)** 20 mA/cm², **e)** 25 mA/cm² y **f)** 30 mA/cm².

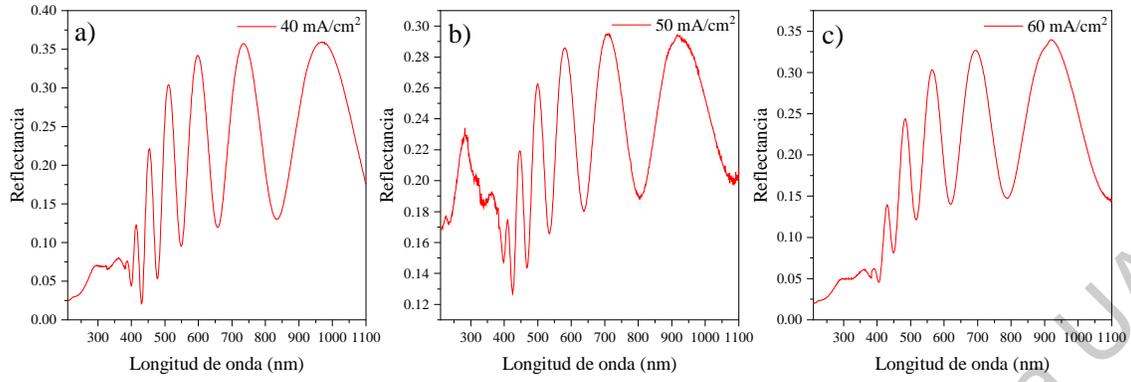


Figura B.2: Espectros de reflectancia de la serie de calibración S1 de las muestras **a)** 40 mA/cm², **b)** 50 mA/cm² y **c)** 60 mA/cm².

Dirección General de Bibliotecas de la UAQ

Serie de calibración 2 (S2)

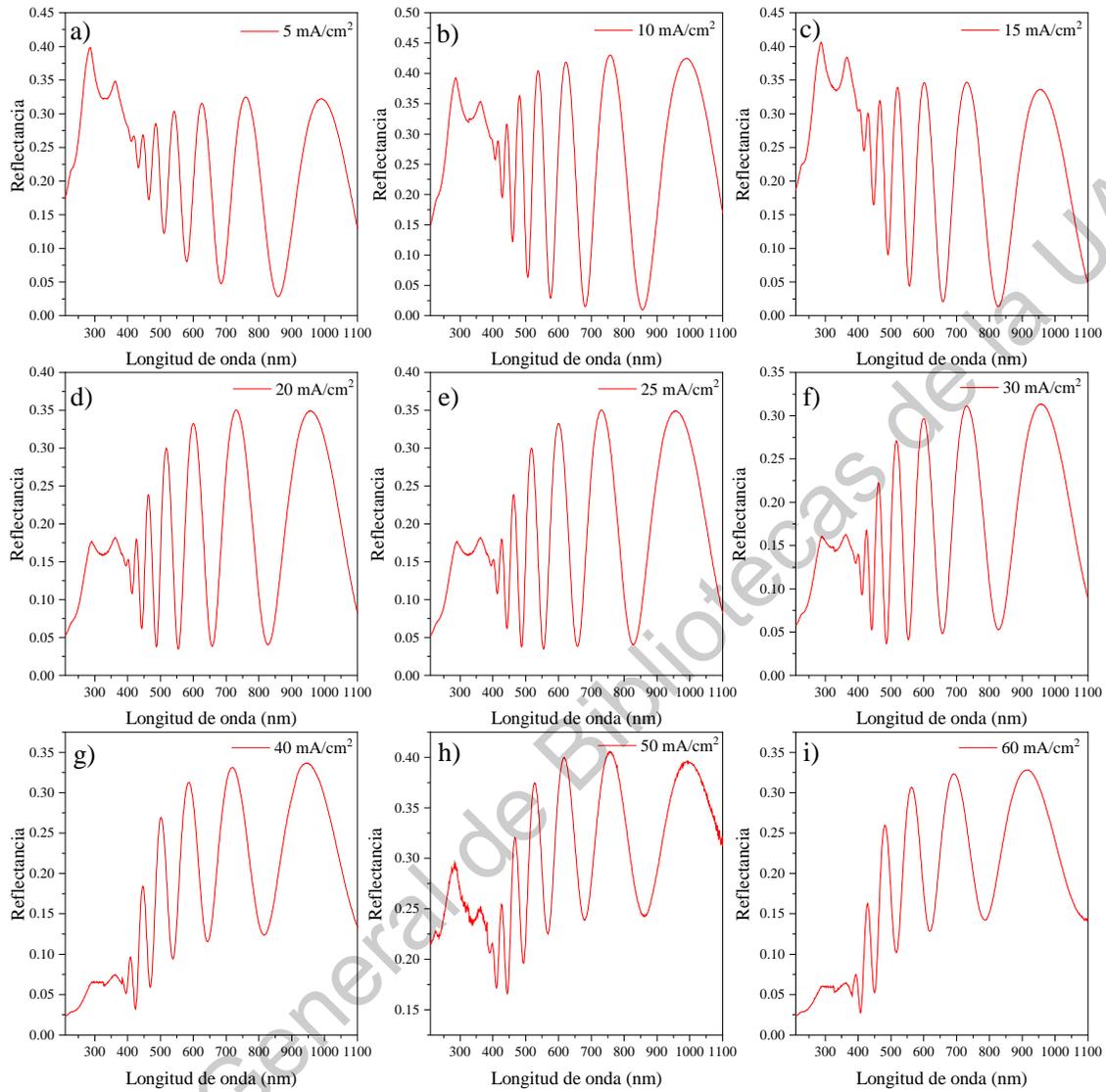


Figura B.3: Espectros de reflectancia de la serie de calibración S2 de las muestras **a)** 5 mA/cm², **b)** 10 mA/cm², **c)** 15 mA/cm², **d)** 20 mA/cm², **e)** 25 mA/cm², **f)** 30 mA/cm², **g)** 40 mA/cm², **h)** 50 mA/cm² y **i)** 60 mA/cm².

Publicaciones



Effects of the interface roughness in the optical response of one-dimensional photonic crystals of porous silicon

I.A. Lujan-Cabrera^a, C.F. Ramirez-Gutierrez^{a,b}, J.D. Castaño-Yepes^c, M.E. Rodriguez-Garcia^d

^a Ingeniería Física, Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro, C.P. 76010, Querétaro, Qro., Mexico

^b Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales, Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada, Universidad Nacional Autónoma de México Campus Juriquilla, C.P. 76230, Qro., Mexico

^c Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, México Distrito Federal, C. P. 04510, Mexico

^d Departamento de Nanotecnología, Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada, Universidad Nacional Autónoma de México Campus Juriquilla, C.P. 76230, Qro., Mexico

ARTICLE INFO

Keywords:

Transfer matrix
Porous silicon
Admittance
Scattering
Reflectance
Quantum confinement

ABSTRACT

Photonic structures such as distributed Bragg reflectors (DBR) frequently present fabrication defects like as rough interfaces. Also, other materials like porous media present these defects inherently. Therefore, this work describes the optical response of one-dimensional photonic crystals (PhC) with roughness contributions using the transfer matrix method (TMM). A statistical procedure was performed in order to introduce roughness in the simulation as a root mean square (RMS) of the irregularities of each interface. It was found that the location where the rough interface is placed has effects on different regions of the spectrum, considerably affecting DBR optical quality. Finally, porous silicon (PSi) DBR was designed and fabricated with the purpose of comparing its optical response with the simulations.

1. Introduction

The distribution of the refractive indexes in space determines the optical response of photonic crystals (PhC.) In the case of one-dimensional (1D) PhC, such as a Distributed Bragg Reflector (DBR), the per-

[4,5]. Besides, there are other parameters which can modify the optical response of a PhC. Kumar et al. [9] reported the effect of temperature on the photonic band gap in Si-based PhC, and Segovia-Chaves et al. describes the effects on the photonic band structure as a function of temperature [10–12] and hydrostatic pressure [13,14] in a diverse

OPEN

Design, fabrication, and optical characterization of one-dimensional photonic crystals based on porous silicon assisted by *in-situ* photoacoustics

Received: 10 June 2019
Accepted: 29 August 2019
Published online: 14 October 2019

Cristian Felipe Ramirez-Gutierrez^{1,3}, Harol David Martinez-Hernandez²,
Ivan Alonso Lujan-Cabrera³ & Mario Enrique Rodriguez-Garcia¹

We present a methodology to fabricate one-dimensional porous silicon (PSi) photonic crystals in the visible range by controlled etching and monitored by photoacoustics. Photoacoustic can record *in-situ* information about changes in the optical path and chemical reaction as well as in temperature, refractive index, and roughness during porous layers formation. Radiometry imaging can determine the carrier distribution of c-Si substrate that is a fundamental parameter to obtain high-quality PSi films. An electrochemical cell was calibrated through a series of single PSi layers that allows knowing the PA amplitude period, porosity, and roughness as a function of the current density. Optical properties of single layers were determined using the reflectance response in the UV-Vis range to solve the inverse problem through genetic algorithms. PhC structures were designed using the transfer matrix method and effective media approximation. Based on the growth kinetics of PSi single layers, those structures were fabricated by electrochemical etching monitored and controlled by *in-situ* photoacoustics.



Discussion

Comments on *Superstatistical properties of the one-dimensional Dirac oscillator* by Abdelmalek Boumali et al.[☆]

Jorge David Castaño-Yepes^{a,*}, I.A. Lujan-Cabrera^b, C.F. Ramirez-Gutierrez^c

^a Instituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 70-543, México Distrito Federal 04510, Mexico

^b Ingeniería Física, Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro, C.P. 76010 Querétaro, Qro., Mexico

^c Universidad Politécnica de Querétaro, El Marqués, Qro., Mexico

ARTICLE INFO

Article history:

Received 8 June 2020

Received in revised form 28 August 2020

Available online xxxx

ABSTRACT

In this comment, we discuss the mathematical formalism used in Boumali et al. (2020) which describes the superstatistical thermal properties of a one-dimensional Dirac oscillator. In particular, we point out the importance of maintaining the Legendre structure unaltered to ensure an accurate description of the thermodynamic observables when a Tsallis-like statistical description is assumed. Also, we remark that all the negative poles have to take into account to calculate the Gibbs-Boltzmann partition function. Our findings show that the divergences obtained by the authors in the Helmholtz free energy, which are propagated to the other thermal properties, are a consequence of an incomplete partition function. Moreover, we prove that the restrictions over the q -parameter are not needed if an appropriate partition function describes the system.

© 2020 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

The recently published paper by A. Boumali et al. [1] shows the calculation of the thermal properties of a one-dimensional Dirac oscillator, in the framework of the superstatistics theory using the Gamma function as the distribution function. The authors calculate the Helmholtz free energy, the internal energy, the entropy, and the specific heat.